



Luís Diogo Almeida Amiano

Licenciado em Ciências da Engenharia Mecânica

Análise e otimização de materiais compósitos de microestrutura periódica

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Pedro Samuel Gonçalves Coelho, Prof. Auxiliar da Faculdade
de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa

Júri:

Presidente: Prof.^a Dra. Marta Isabel Pimenta Verdete da Silva Carvalho

Arguente: Prof. Dr. João Mário Burguete Botelho Cardoso

Vogal: Prof. Dr. Pedro Samuel Gonçalves Coelho



FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Março 2015

Copyright

Análise e otimização de materiais compósitos de microestrutura periódica

Copyright © Luís Diogo Almeida Amiano, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade Nova de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Professor Doutor Pedro Coelho, pela sua disponibilidade e dedicação que tornou possível a realização desta dissertação. Estou muito grato por todos os conhecimentos transmitidos e pela motivação dada no decorrer do trabalho.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica e Industrial (DEMI) por disponibilizar as instalações e equipamentos indispensáveis para o desenvolvimento deste trabalho.

A todos os meus familiares e especialmente aos meus pais pelo seu apoio incondicional e pelo financiamento de todo o meu desenvolvimento académico, sem eles não seria a pessoa que sou hoje. Agradeço ao meu irmão por todos os bons momentos que permitiram ultrapassar as dificuldades e obstáculos encontrados nesta caminhada.

À minha namorada, Andreia, que foi um apoio incondicional durante todos estes anos e sempre acreditou que eu seria capaz.

Por fim, agradeço a todos os meus amigos pela amizade e companheirismo demonstrados ao longo destes anos.

Resumo

A presente dissertação tem como principais objetivos a otimização topológica de materiais compósitos de microestrutura periódica e a análise de efeitos de escala na caracterização das propriedades elásticas dos mesmos.

No desenvolvimento deste trabalho, é abordada a teoria da homogeneização que é usualmente utilizada para estimar as propriedades elásticas de materiais compósitos periódicos de modo a tratar um meio heterogêneo como um meio homogêneo com propriedades mecânicas equivalentes. É realizada uma verificação e validação das hipóteses utilizadas por esta teoria, com o fim de determinar em que condições os resultados homogeneizados são credíveis e qual a margem de erro associada a esses mesmos resultados.

O modelo de material aqui utilizado é obtido pela repetição de uma célula de base unitária (microestrutura representativa) em todas as direções espaciais. Trata-se de um modelo de material tridimensional de duas fases, sólido e vazio (material poroso).

São estudadas diferentes topologias de microestruturas, obtidas através de um algoritmo de otimização topológica utilizando o método da homogeneização inversa. Para que fosse utilizada uma amostra suficientemente representativa de diferentes casos de anisotropia de material, foi utilizado um gerador de números aleatórios para reproduzir os estados de tensão ou deformação a serem utilizados no processo de otimização das microestruturas. Desta forma, é realizado um estudo quanto à anisotropia de material e a sua influência nas propriedades elásticas do material.

O estudo de efeitos de escala toma uma grande importância neste trabalho, sendo estimados numericamente os tensores elásticos que caracterizam o material e estudada a sua convergência em relação aos tensores obtidos pelo método da homogeneização. Da mesma forma, é realizado um estudo numérico de convergência da densidade de energia de deformação e de tensão para diferentes condições de ensaios mecânicos.

Os resultados indicam que um baixo fator de escala é suficiente para substituir um compósito heterogêneo por um material homogêneo com propriedades elásticas calculadas pela teoria da homogeneização.

Palavras-chave:

Homogeneização, otimização, topologia, microestruturas, celular, material

Abstract

This work has as main objectives the topology optimization of composite materials with periodic microstructure and the scale-size effects analysis in the characterization of the materials elastic properties.

The homogenization theory is usually used to compute the elastic proprieties of periodic composite materials replacing a heterogeneous composite by the equivalent homogeneous material. Authentication of the assumptions used by this theory is performed in order to determine under what conditions the homogenized results are acceptable and the error associated with those results.

The material model used here is obtained by repeating an unit-cell (representative microstructure) in all spatial directions. This is a three-dimensional material model of two phases, solid and void (porous material).

Different topologies obtained by topology optimization algorithm using the inverse homogenization method are studied. To guarantee a sufficiently representative sample of the material anisotropy, a random number generator was used to reproduce the stress or deformation fields to be used in the microstructure optimization process. Thus, a study regarding material anisotropy and their influence in material elastic properties is accomplished.

The scale-size effects as a major importance in this work. Convergence to the homogenized properties is checked then. Equally, is also realized a numerical study of the strain and stress energy density convergence for different mechanical tests.

The outcomes indicates that a low scale factor it is sufficient to use the homogenized properties in engineering projects.

Keywords:

Homogenization, optimization, topology, microstructures, cellular, material

Índice

Copyright	III
Agradecimentos	V
Resumo.....	VII
Abstract	IX
Índice	XI
Índice de Figuras	XIII
Índice de Tabelas.....	XVII
Simbologia e notações	XIX
1. Introdução	1
1.1 Objetivos da dissertação	3
1.2 Estrutura da dissertação.....	4
2. Estado da arte	5
2.1 Otimização estrutural.....	5
2.2 Materiais compósitos	8
2.2.1 Propriedades mecânicas.....	9
2.2.2 Aplicações industriais	10
2.2.3 Microestrutura periódica	12
3. Análise e otimização de material	15
3.1 Modelo de material.....	15
3.2 Problema de otimização	17
3.3 Homogeneização	21
3.4 Efeitos de escala	25
3.5 Tensores constitutivos.....	26
3.5.1 Tensor de rigidez	26
3.5.2 Tensor de flexibilidade	29
3.5.3 Classes de simetria do tensor	30

3.6	Medidas de anisotropia.....	34
3.7	Energia elástica.....	35
4.	Caracterização de propriedades mecânicas.....	37
4.1	Ensaio normalizados	38
4.1.1	Condições de Dirichlet.....	38
4.1.2	Condições de Neumann.....	40
4.2	Condições fronteira alternativas	42
4.2.1	Tensão	42
4.2.2	Mistas	44
4.3	Médias volúmicas locais	46
5.	Resultados	49
5.1	Topologias ótimas	49
5.2	Análise de efeitos de escala	53
5.2.1	Condições fronteira periódicas.....	53
5.2.2	Coeficientes do tensor de elasticidade	56
5.2.3	Energia ou <i>compliance</i>	67
6.	Conclusões e desenvolvimentos futuros.....	69
	Referências bibliográficas.....	71
	Anexos.....	77
	Anexo I.....	79
	Anexo II.....	80

Índice de Figuras

Capítulo 2

Figura 2.1 - Processo de otimização dimensional.....	6
Figura 2.2 - Processo de otimização de forma, adaptado de Bendsøe e Sigmund, (2003).	6
Figura 2.3 - <i>Ground structure</i> de domínio retangular com 15 nós, adaptado de Bendsøe e Sigmund, (2003).	7
Figura 2.4 - Exemplo de otimização topológica a partir de um domínio contínuo de elementos finitos.....	8
Figura 2.5 - Módulo de <i>Young</i> em função da tensão de cedência das diferentes classes de materiais, extraído de Ashby, (2008).	10
Figura 2.6 - Composição de um avião comercial, adaptado de Boeing, 2013.	11
Figura 2.7 - Estrutura com coeficiente de Poisson negativo, adaptado de Andreassen <i>et al.</i> , (2014).	13
Figura 2.8 - Suporte biomimético para correção de defeito no fémur, adaptado de Wieding <i>et al.</i> , (2014).	13

Capítulo 3

Figura 3.1 - Modelo de material: a) Domínio do material Ψ (escala macroscópica); b) Domínio da microestrutura Y (escala microscópica).....	16
Figura 3.2 - Representação da malha de elementos finitos utilizada (domínio da célula unitária Y).	17
Figura 3.3 - Problema de <i>checkerboard</i> , adaptado de Bendsøe e Sigmund, (2003).	19
Figura 3.4 - Representação da vizinhança de um elemento k definida pelo r_{min}	20
Figura 3.5 - Conceito de homogeneização para um material celular.	22
Figura 3.6 - Representação esquemática de um padrão periódico infinito gerado pela repetição da célula de base unitária nas três direções espaciais.....	22
Figura 3.7 - Representação esquemática das condições de periodicidade no domínio microscópico e macroscópico.	23
Figura 3.8 - Fluxograma do algoritmo de otimização utilizado no presente trabalho.	24
Figura 3.9 - Cubo unitário com $n \times n \times n$ repetições da célula unitária.....	25

Figura 3.10 - Hierarquia das classes de simetria e o número de planos suficientes para a definição das mesmas (Chadwick <i>et al.</i> , 2001).	30
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Capítulo 4

Figura 4.1 - Testes numéricos nas condições de Dirichlet (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;.....	39
Figura 4.2 - Testes numéricos nas condições de Neumann (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;.....	41
Figura 4.3 - Testes numéricos com tensão constante na fase sólida (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;	43
Figura 4.4 - Testes numéricos com condições mistas (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;	44
Figura 4.5 - Condições de ensaio equivalentes (aplicando um deslocamento nos elementos e aplicando uma tensão em uma placa rígida).	45
Figura 4.6 - Representação esquemática do domínio Y da célula central em um padrão periódico $3 \times 3 \times 3$	46
Figura 4.7 - Efeitos de escala na topologia da célula central (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). Para $n = 2$, $n = 4$ e $n = 6$, a média local é realizada na célula descentrada.....	47

Capítulo 5

Figura 5.1 - Representação da célula unitária utilizada e dos planos apresentados nas tabelas 5.4 e 5.5 no estudo da periodicidade da deformação.	53
Figura 5.2 - Análise dos efeitos de escala para o caso hidrostático com $V^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; d) Condições mistas com $Esólido/Evazio = 10^{12}$.	57
Figura 5.3 - Análise dos efeitos de escala para o caso triaxial com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; d) Condições mistas com $Esólido/Evazio = 10^{12}$. (Adaptado de Coelho <i>et al.</i> , 2015)	57

- Figura 5.4** - Análise dos efeitos de escala para o caso **biaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $Esólido/Evazio = 10^3$; d) Condições mistas com $Esólido/Evazio = 10^3$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015)..... 58
- Figura 5.5** - Análise dos efeitos de escala para o caso **uniaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $Esólido/Evazio = 10^3$; d) Condições mistas com $Esólido/Evazio = 10^3$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015)..... 58
- Figura 5.6** - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte2** com $V^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015) 58
- Figura 5.7** - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte3a** com $V^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$ 59
- Figura 5.8** - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte3b** com $V^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015) 59
- Figura 5.9** - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte3b** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015) 59
- Figura 5.10** - Análise dos efeitos de escala para o caso **hidrostático** com $V^* = 50\%$ – média local. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; d) Condições mistas com $Esólido/Evazio = 10^{12}$.62
- Figura 5.11** - Análise dos efeitos de escala para o caso **triaxial** com $k^* = 50\%$ – média local. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; d) Condições mistas com $Esólido/Evazio = 10^{12}$.62
- Figura 5.12** - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte3b** com $k^* = 50\%$ - média local. a) Condições de Dirichlet com $Esólido/Evazio = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $Esólido/Evazio = 10$ 63
- Figura 5.13** - Representação gráfica da assimetria dos tensores estimados através de condições não-normalizadas para o caso **triaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet –

Média local; b) Condições de Neumann – Média local; c) Tensão constante na fase sólida – Média global; d) Tensão constante na fase sólida – Média local; e) Condições mistas – Média global; f) Condições mistas – Média local.	65
Figura 5.14 - Representação gráfica da assimetria dos tensores estimados através de condições não-normalizadas para o caso corte3b com $k = 50\%$. a) Condições de Dirichlet – Média local; b) Condições de Neumann – Média local.....	66
Figura 5.15 - Convergência da densidade de energia de deformação para as condições de Dirichlet (linhas a tracejado) e de Neumann (linhas sólidas). Adaptado de Coelho <i>et al.</i> , (2015)	67
Figura 5.16 - Convergência da densidade de energia de tensão para as condições de Dirichlet (linhas a tracejado) e de Neumann (linhas sólidas). Adaptado de Coelho <i>et al.</i> , (2015)	68

Índice de Tabelas

Capítulo 3

Tabela 3.1 - Comparação entre a notação do tensor e da forma reduzida (matricial)	27
Tabela 3.2 - Número de planos de simetria e componentes independentes para diferentes casos de simetria.....	34

Capítulo 5

Tabela 5.1 - Estados de tensão normais e topologias ótimas correspondentes (apenas é mostrada fase sólida) para constrangimentos de volume e de permeabilidade. Representação gráfica da anisotropia e correspondente valor de \mathcal{A}	50
Tabela 5.2 - Estados de tensão em planos de corte e topologias ótimas correspondentes (apenas é mostrada fase sólida) para constrangimentos de volume e de permeabilidade. Representação gráfica da anisotropia e correspondente valor de \mathcal{A}	51
Tabela 5.3 - Tensores de elasticidade homogeneizados das 8 microestruturas selecionadas [MPa].....	52
Tabela 5.4 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio longitudinal na direção x aplicando as condições de Dirichlet.....	54
Tabela 5.5 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio de corte no plano xy aplicando as condições de Dirichlet.....	55

Anexos

Tabela A.1 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio longitudinal na direção x aplicando as condições de Neumann.	79
Tabela A.2 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio de corte no plano xy aplicando as condições de Neumann.	80

Simbologia e notações

Latim

\mathcal{A}	Parâmetro adimensional que quantifica a anisotropia de material.
\mathbf{A}, \mathbf{B}	Tensores elásticos arbitrários.
\mathbf{C}^D, C_{ijkl}^D	Tensor da flexibilidade estimado através das condições de Dirichlet.
\mathbf{C}^H, C_{ijkl}^H	Tensor da flexibilidade homogeneizado.
\mathbf{C}^N, C_{ijkl}^N	Tensor da flexibilidade estimado através das condições de Neumann.
D	Dimensão característica do domínio macroscópico.
d	Dimensão característica do domínio microscópico.
E^0	Módulo de elasticidade do material base da microestrutura.
E_{ijkl}^0	Tensor da elasticidade ou rigidez do material base da microestrutura.
E_{ijkl}	Tensor da elasticidade ou rigidez.
\mathbf{E}^D, E_{ijkl}^D	Tensor da elasticidade ou rigidez estimado através das condições de Dirichlet.
\mathbf{E}^H, E_{ijkl}^H	Tensor da elasticidade ou rigidez homogeneizado.
\mathbf{E}^N, E_{ijkl}^N	Tensor da elasticidade ou rigidez estimado através das condições de Neumann.
$E_{sólido}$	Módulo de elasticidade do material dos elementos da fase sólida.
E_{vazio}	Módulo de elasticidade do material dos elementos da fase de vazio.
F_n	Força aplicada em um nó.
G	Módulo de corte do material.
\hat{H}	Operador de convulsão utilizado no filtro de sensibilidades.
k^*	Limite superior para a fração de permeabilidade o material.
\mathbf{K}, K_{ij}	Matriz de permeabilidade.
\mathbf{K}^H, K_{ij}^H	Matriz de permeabilidade homogeneizada.
\mathbf{n}	Normal à superfície.
n	Fator de escala.
N	Número de elementos que compõem a malha.
N_n	Número de elementos a que pertence o nó.
N_{Sn}	Número de elementos da fase sólida a que pertence o nó.
p	Expoente de penalização do modelo SIMP.

q^*	Módulo de compressibilidade.
R_{ij}	Matriz de rotação.
r_{min}	Raio do filtro de sensibilidades.
u^*	Módulo de corte.
V^*	Limite superior para a fração volúmica de material disponível.
W	Trabalho por unidade de volume.
Y	Domínio microscópico.
x_i	Vetor posição no domínio macroscópico.
y_i	Vetor posição no domínio microscópico.

Grego

β	Constante arbitrária.
γ	Distorção.
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
ϵ, ϵ_{ij}	Tensor das extensões.
θ_i	Ângulos de Euler.
μ	Função densidade microscópica.
μ_{min}	Limite inferior para a densidade microscópica.
ν	Coeficiente de Poisson do material.
ρ	Função densidade macroscópica.
σ, σ_{ij}	Tensor das tensões.
\emptyset	Diâmetro da secção transversal das barras.
τ	Tensão de corte.
χ_i	Modos de deformação locais da célula.
Ψ	Domínio macroscópico.
ψ	Função arbitrária.

Operadores

$\langle . \rangle$	Simbologia que se refere à média volumétrica.
---------------------	-----------------------------------------------

Abreviaturas

APDL	Ansys Parametric Design Language
MMA	Method of Moving Asymptotes
MTS	Machine Testing System
PLC	Polycaprolactone
SIMP	Solid Isotropic Material with Penalisation

1. Introdução

Fazendo uma passagem pelas diversas áreas da engenharia, em todas elas está presente o departamento de projeto e concepção, onde se encontra em foco a análise e a otimização de material e de estruturas. Sendo este o grande tema da presente dissertação, serão abordadas as metodologias e os processos pelos quais passam os projetos de engenharia, tendo-se em foco os que mais se adequam ao projeto de estruturas e de materiais compósitos.

Para a obtenção das respostas e características mecânicas das estruturas e dos materiais sujeitos a diversos carregamentos, como por exemplo, tensões ou deslocamentos, recorre-se a análises estruturais. Os resultados destas são usados para verificar a aptidão de uma estrutura para o seu uso, sendo muitas das vezes apenas necessário realizar testes por modelos numéricos e analíticos. Os modelos analíticos são precisos, pois a resposta do sistema é determinada sem qualquer tipo de aproximação. No entanto, os modelos numéricos, além de facilitarem a resolução de problemas mais complexos, são muito eficientes e aproximados da realidade. Já os métodos experimentais têm procedimentos no qual a sua precisão depende das condições de trabalho, isto é, da experiência do investigador e dos equipamentos utilizados, sendo que estes não são os mais utilizados quando o objetivo passa pelo projeto de estruturas.

Sempre que possível, é interessante que pelo menos dois métodos sejam utilizados, pois possibilita a comparação de resultados e diminui a hipótese da resposta encontrada estar errada.

A otimização estrutural é uma matéria que abrange um conjunto de teorias e metodologias que procuram obter a distribuição ótima de material de uma estrutura para desempenhar uma determinada função. Esta desempenha um papel fundamental nos departamentos de projeto de estruturas e por outro lado contribui para sistematizar o processo de otimização do projeto.

O avanço tecnológico tem permitido o estudo aprofundado de temas ligados à engenharia e para ambos os processos (otimização e análise), é usual recorrer-se à utilização do computador, ou em problemas mais complexos, à utilização de *clusters* de computação paralela para uma mais rápida resolução dos mesmos. O *software* Ansys foi utilizado neste trabalho para a realização da modelação numérica através da aproximação pelo modelo de elementos finitos, sendo este recomendado para a análise de estruturas complexas.

Nesta dissertação são colocados em foco os materiais compósitos, tendo estes ao longo dos anos sofrido uma grande evolução em diferentes áreas da engenharia (automóvel, aeroespacial, naval, etc.), bem como na biomecânica, devido às características únicas presentes nos mesmos. Estes são obtidos pela combinação de dois ou mais constituintes (fases) diferentes, muitas vezes com propriedades físicas e químicas muito distintas. Com a junção dessas diferentes propriedades, os materiais compósitos oferecem na sua utilização diferentes propriedades das encontradas nos componentes individuais que os constituem. Com a modernização e os avanços obtidos pelas diversas áreas de investigação, neste momento, é possível encontrar materiais compósitos com uma elevada resistência em comparação com o seu baixo peso, mas também materiais com características únicas de flexibilidade permitindo que estes sejam moldados em formas muito complexas.

A classe de materiais compósitos considerados nesta dissertação é de microestrutura periódica onde a heterogeneidade do meio pode ser descrita pela periodicidade de uma célula de base unitária em todas as direções do espaço. A geometria desta célula é o objeto de estudo aqui não só apenas do ponto de vista da análise das propriedades mecânicas mas também da sua eficiência para uma medida de desempenho pretendida para o material e restrições funcionais de projeto.

Existe frequentemente a necessidade de procurar a utilização de um método que forneça uma boa relação entre a precisão e os custos computacionais em análises de estruturas complexas. Por essa mesma razão é usual recorrer-se à utilização da teoria de simplificação de cálculo de propriedades mecânicas equivalentes denominada de homogeneização. A utilização desta teoria não só permite determinar as constantes elásticas de materiais compósitos considerando a sua microestrutura, como permite realizar análises numéricas complexas com menores gastos computacionais, pois esta transforma um meio heterogéneo em um meio homogéneo com propriedades elásticas equivalentes. Dadas as simplificações assumidas por

esta teoria, a validação das mesmas toma uma importância extrema na utilização dos resultados obtidos, sendo essa uma das motivações que levaram à concretização deste trabalho.

1.1 Objetivos da dissertação

A presente dissertação de mestrado tem como principal objetivo o desenvolvimento da investigação científica relacionada com a análise e o projeto ótimo de materiais compósitos, nomeadamente material celular de microestrutura periódica, aplicando a otimização topológica de estruturas a um problema de minimização de flexibilidade com constrangimentos de volume ou permeabilidade de forma a obter a distribuição ótima de material. Uma das principais aplicações desta dissertação e onde é realizada uma investigação muito ativa é no projeto de *scaffolds* (suportes biomiméticos), onde estes têm como função a correção de fraturas e defeitos em tecidos ósseos, tanto em animais como em seres-humanos.

Começando pelo estudo de Bendsøe e Sigmund, (2003) e de forma a aprofundar o conhecimento em otimização topológica inicia-se o trabalho da presente dissertação com a utilização de um código Matlab desenvolvido por Sigmund (2001) para correr diversos exemplos de estruturas em domínios bidimensionais com diferentes condições de fronteira. Depois disso é dada continuação passando à utilização de um código FORTRAN juntamente com um código APDL de otimização topológica de estruturas tridimensionais, sendo estes últimos uma maior aproximação ao que virá a ser feito posteriormente.

O contributo deste trabalho ao nível da análise de materiais compósitos de microestrutura periódica permite obter as propriedades mecânicas dos mesmos aplicando a teoria da homogeneização. Sendo esta uma simplificação e uma aproximação ao cálculo de propriedades mecânicas do compósito, é realizada uma comparação entre os resultados obtidos pela realização de ensaios numéricos a diferentes amostras do compósito e os resultados obtidos pela teoria da homogeneização, de forma a verificar em que condições é válida e razoável esta aproximação. Também do ponto de vista de complexidade, o trabalho efetuado nesta dissertação representa um avanço em comparação com os trabalhos publicados anteriormente dado que serão também estimadas nas três direções espaciais (modelo tridimensional) as componentes não-longitudinais do tensor de elasticidade do material e analisada a sua convergência para os valores homogeneizados.

Os objetivos mais específicos desta dissertação que levam à concretização dos anteriores, passam pela realização e adaptação de algoritmos para cálculo das propriedades elásticas dos materiais através de ensaios numéricos, algoritmos de otimização topológica para obtenção de topologias anisotrópicas e aplicação dos fundamentos teórico-práticos referidos anteriormente.

1.2 Estrutura da dissertação

Esta dissertação encontra-se dividida em 6 capítulos, sendo que o presente capítulo (capítulo 1) faz uma introdução ao tema desta dissertação e são descritas as motivações e objetivos que levaram à realização da mesma.

O capítulo 2 faz uma apresentação do estado da arte dos principais focos desta dissertação, a análise e otimização de material e os materiais compósitos de microestrutura periódica. De uma forma geral, este capítulo expõe os principais trabalhos a que esta dissertação dá continuidade.

No capítulo 3 é realizada uma exposição dos processos e metodologias utilizados na análise e na otimização para a obtenção dos resultados apresentados no capítulo 5. É portanto um capítulo dedicado ao modelo numérico, algoritmos de otimização e análise. Também é feito neste capítulo um resumo acerca da anisotropia de material e formas utilizadas para o quantificar.

As condições fronteira utilizadas nos ensaios numéricos são uma parte importante do trabalho realizado ao longo desta dissertação, sendo estas apresentadas no capítulo 4. Aqui são justificadas as simplificações e adaptações realizadas de forma a utilizar a análise numérica minimizando os custos computacionais.

Os resultados obtidos e as discussões dos mesmos estão presentes no capítulo 5. Este capítulo encontra-se dividido em duas partes, otimização e análise, estando presente na primeira as topologias ótimas das microestruturas obtidas para diferentes estados de carregamento, e na segunda a influência dos efeitos de escala no cálculo das propriedades elásticas através dos ensaios numéricos em relação às propriedades estimadas pela teoria da homogeneização. Ainda em relação aos efeitos de escala são verificadas as condições de periodicidade assumidas pelo método da homogeneização.

Por último, no capítulo 6 estão presentes as conclusões, onde é feita uma síntese do trabalho realizado ao longo da dissertação e dos resultados obtidos pelo mesmo. Neste capítulo são apresentados possíveis desenvolvimentos futuros de forma a dar continuidade à investigação realizada neste trabalho.

2. Estado da arte

2.1 Otimização estrutural

Por otimização estrutural compreende-se um meio ou uma metodologia com vista à obtenção de uma configuração ótima da estrutura de forma a cumprir a sua função de serviço previamente definida (transmitir esforços mecânicos estáticos ou dinâmicos). Para tal, é definida uma função objetivo (massa, rigidez, estabilidade, etc.), um conjunto de constrangimentos que a estrutura terá de respeitar (volume, tensão máxima admissível nos elementos, deslocamentos máximos, permeabilidade do material, etc.) e um conjunto de variáveis de projeto que podem sofrer alteração de valor ao longo da otimização (áreas, densidade, materiais, etc.).

O projeto ótimo de estruturas está associado a um processo iterativo controlado por um algoritmo de otimização. Após a formulação do problema, poderão haver várias soluções do mesmo (ótimos locais) ou existe uma que será a que de melhor maneira cumpre todos os requisitos (ótimo global).

A área da otimização estrutural pode ser categorizada em três principais categorias: Otimização dimensional, otimização de forma e otimização de topologia. Para além destas três

categorias pode ainda acrescentar-se a otimização de material, onde tem-se como objetivo encontrar o material ótimo para uma determinada função objetivo.

Começando pela otimização dimensional, esta é utilizada para encontrar as dimensões da estrutura de forma a torná-la o mais eficiente possível para uma determinada função. Este é um processo muito utilizado, por exemplo, no dimensionamento das secções transversais das barras de uma treliça. Este processo tem algumas limitações, pois ao nível da forma e da topologia da estrutura não apresentam qualquer alteração/melhoria ao longo de todo o processo de otimização. Aqui as variáveis de projeto são as dimensões dos elementos estruturais, podem variar de forma contínua ou discreta. A figura 2.1 ilustra um exemplo de otimização dimensional, onde os diâmetros das secções transversais das barras são as variáveis de projeto.

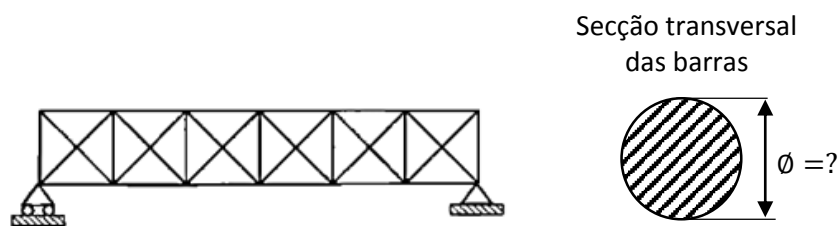


Figura 2.1 - Processo de otimização dimensional.

Em um processo de otimização de forma, as dimensões e a topologia da estrutura são as definidas à partida, aqui considera-se como variável de projeto a fronteira da estrutura. Isto é, as variáveis de projeto são as coordenadas dos pontos que delimitam essa mesma fronteira, levando então a que no fim do processo de otimização, a forma da estrutura seja a que melhor cumpre o objetivo do projeto. A figura 2.2 apresenta a resolução de um problema de otimização de forma, aqui a solução é interpretada através da presença e ausência de material em função das suas coordenadas de posição. Os pontos de material no domínio estão representados pela cor preta, enquanto o branco simboliza os pontos sem material (vazio).

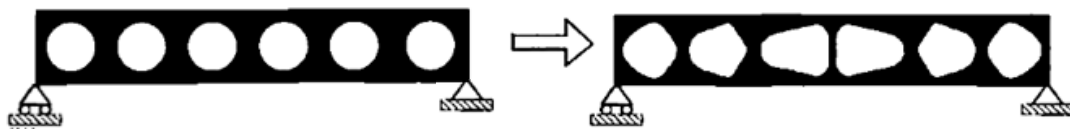


Figura 2.2 - Processo de otimização de forma, adaptado de Bendsøe e Sigmund, (2003).

Apesar da limitação destas duas categorias de otimização estrutural, quando utilizadas em conjunto produzem resultados melhores do que quando utilizadas individualmente. Contudo, a estrutura final estará sempre dependente da topologia pré-definida (visto que esta não sofre

alterações/melhorias em nenhum dos processos) e por essa mesma razão, o resultado obtido poderá ser ainda sub-ótimo.

A par da otimização dimensional e de forma, a otimização topológica procura encontrar a solução (estrutura ou material) com o melhor desempenho para cumprir uma dada função, no entanto, esta última é menos limitada do que as anteriores e os resultados produzidos pela mesma permitem uma melhor aproximação da solução ideal.

A otimização topológica de estruturas pode ser dividida em duas categorias diferentes: A otimização topológica a partir de um meio discreto, onde o domínio contínuo é aproximado por um conjunto de elementos de barra ou viga em que as dimensões das suas secções transversais são as variáveis do projeto, ver figura 2.3. Este método de otimização é conhecido por *ground structure approach*. E a otimização topológica a partir de um meio contínuo, que consiste na determinação para cada ponto do domínio de projeto a presença ou não de material, i.e., procura encontrar a melhor distribuição de material num dado domínio. Aqui é associada uma variável densidade a cada ponto do domínio (ou elemento se for utilizado um método de elementos finitos), sendo a solução apresentada sob a forma de presença ou ausência de material ao longo de todo o domínio.

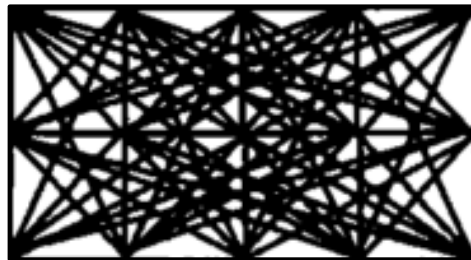


Figura 2.3 - *Ground structure* de domínio retangular com 15 nós, adaptado de Bendsøe e Sigmund, (2003).

O trabalho publicado por Bendsøe e Kikuchi, (1988) é considerado pioneiro na otimização topológica. Estes autores desenvolveram uma metodologia de otimização designada por *método da homogeneização*, utilizando um modelo de material compósito de microestrutura periódica com propriedades elásticas calculadas pela teoria matemática da homogeneização.

Na presente dissertação, o trabalho efetuado concentra-se num meio contínuo utilizando uma malha de elementos finitos para definir o domínio de projeto, onde cada elemento tem uma variável densidade associada. Aqui, quanto mais refinada a malha de elementos, melhor a definição da distribuição de material, no entanto, o resultado produzido por uma malha demasiado refinada em comparação com uma malha comum, leva a uma sobrecarga computacional muitas vezes desnecessária quando são comparadas as diferentes soluções obtidas entre as mesmas. Ainda assim é importante referir que a solução obtida na resolução de

um problema de otimização topológica é dependente da malha utilizada embora técnicas de filtragem possam ser utilizadas para evitar esta dependência.

Uma formulação clássica de um problema de otimização topológica é procurar obter a distribuição ótima de material num dado domínio minimizando a flexibilidade da estrutura (equivalente à maximização da rigidez), com constrangimento de volume.

A figura 2.4 ilustra a resolução de um problema de otimização topológica a partir de um domínio contínuo, onde é representado o domínio (malha de elementos finitos) e as condições fronteira compostas por uma carga distribuída uniformemente na superfície superior do domínio e deslocamentos nulos nas duas direções (horizontal e vertical) nos nós assinalados. A distribuição ótima de material obtida por um algoritmo de otimização topológica deve ser interpretada pelas cores, aqui os elementos preenchidos a preto significam a presença de material enquanto os elementos a branco significam o vazio (ausência de material).

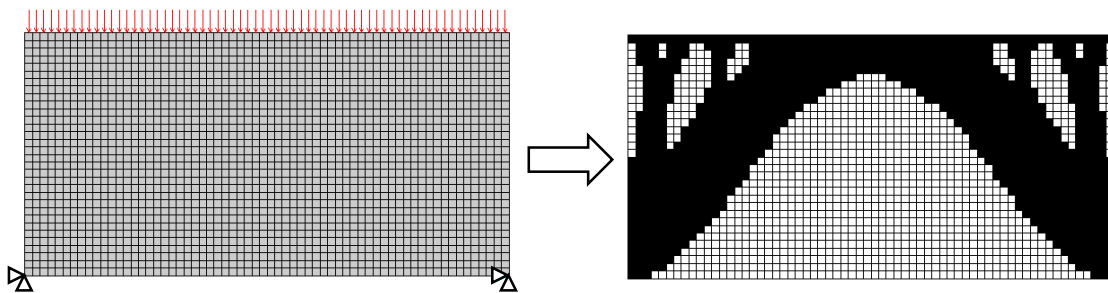


Figura 2.4 - Exemplo de otimização topológica a partir de um domínio contínuo de elementos finitos.

2.2 Materiais compósitos

Os materiais convencionais sofreram diversas alterações para que as suas propriedades pudessem cumprir os requisitos impostos pelo avanço da engenharia e inovação tecnológica. Combinando diferentes propriedades físicas e químicas de diversos materiais foi possível obter uma nova classe de materiais com características únicas denominados de compósitos. Um material diz-se compósito quando é constituído por dois ou mais constituintes (fases) diferentes.

A maioria dos materiais de engenharia são homogêneos e isotrópicos. Um material é homogêneo quando as suas propriedades são independentes da sua posição no corpo, já um corpo é denominado isotrópico quando as suas propriedades num dado ponto são iguais em todas as direções espaciais. Em contraste, os materiais compósitos são geralmente não homogêneos (ou heterogêneos) e anisotrópicos.

O avanço tecnológico não só exigiu o aperfeiçoamento dos materiais compósitos como permitiu que estes pudessem tomar formas cada vez mais complexas, permitindo obter propriedades ainda mais especializadas. A redução de custos levou a que estes materiais ficassem cada vez mais acessíveis a todas as indústrias, no entanto, pode-se concluir que todo

este processo não é mais do que o processo em cadeia onde a evolução tecnológica é o motor. Esta evolução alimenta a expectativa da sociedade em relação à criação de novos produtos e requer investimento em pesquisas de engenharia dos materiais.

Os materiais compósitos podem ser classificados de acordo com a sua matriz e reforço. A matriz é a fase contínua que envolve o reforço (ou fase dispersa), esta tem a função de assegurar a continuidade do conjunto transmitindo os esforços ao reforço, mantendo-os em posição e contribuindo com alguma ductilidade. Já o reforço é o elemento que suporta os esforços no compósito, geralmente de elevada resistência e rigidez. Para que um compósito funcione no seu pleno é necessário que exista uma boa aderência da matriz ao reforço para que haja uma distribuição de esforços eficiente.

Não é só pela mão do homem que existem materiais formados por diferentes constituintes, pois na natureza esta classe de materiais já está presente como é o caso da madeira. A madeira é considerada um material compósito natural, esta é composta por um arranjo complexo de celulose reforçado por uma substância polímera denominada *lenhina* e por outros compostos orgânicos (Ashby, (2008); Okereke *et al.*, 2014). Também encontramos na natureza a cortiça e osso humano como exemplos de materiais compósitos.

2.2.1 Propriedades mecânicas

Os compósitos são uma classe de materiais que possuem uma grande gama de aplicações na indústria, estes apresentam propriedades únicas que não estão presentes nos materiais convencionais. Com o avanço tecnológico as exigências na utilização de materiais aumentaram exponencialmente, criando uma necessidade de produção de novos materiais com uma combinação de propriedades que apenas os compósitos conseguem atingir, como por exemplo uma grande resistência mecânica em conjunto com um baixo peso.

As propriedades dos compósitos dependem de diversos fatores, entre eles as propriedades dos seus constituintes, a sua geometria e as quantidades relativas dos mesmos.

O gráfico apresentado na figura 2.5 permite de forma sucinta compreender as propriedades das várias classes de materiais e fazer uma comparação entre essas mesmas classes facilitando assim a seleção de materiais para um dado fim. Dada a existência de uma vasta gama de materiais e uma grande diversidade de processos para realizar transformações e acabamentos nos mesmos, Ashby *et al.*, (2004) desenvolveu uma metodologia para fazer a correta seleção dos materiais a serem utilizados e os processos de transformação dos mesmos.

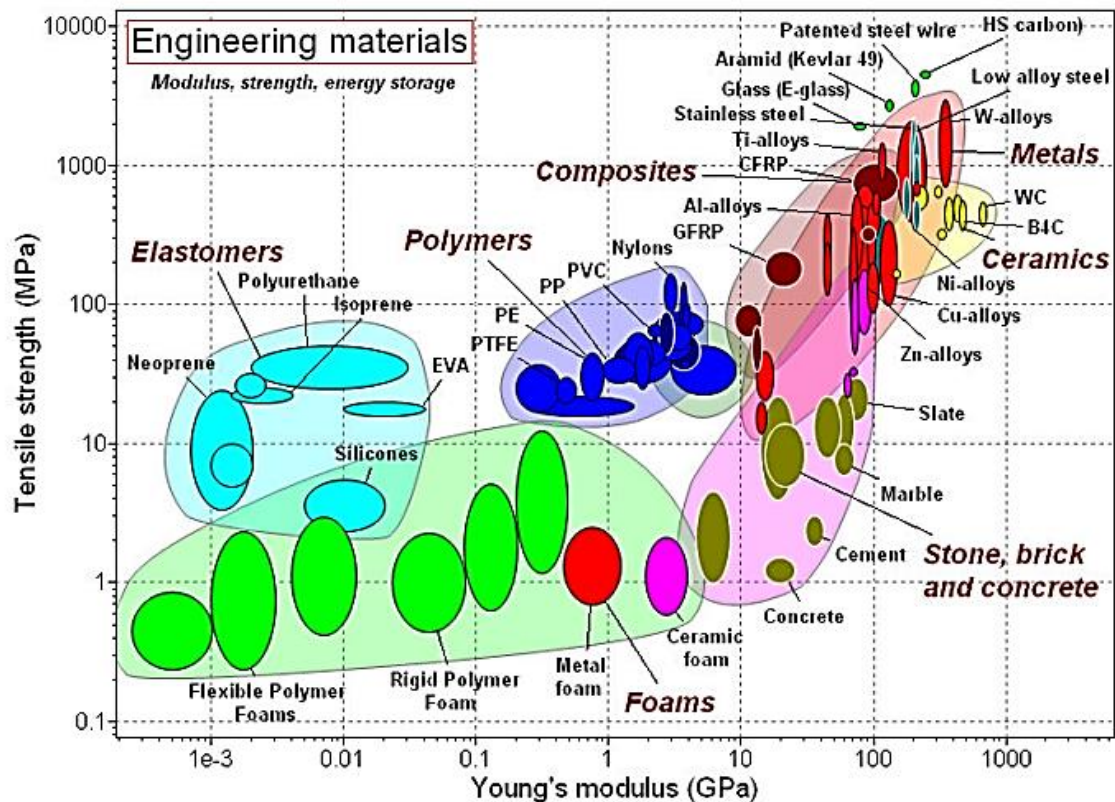


Figura 2.5 - Módulo de Young em função da tensão de cedência das diferentes classes de materiais, extraído de Ashby, (2008).

O aumento da utilização de materiais compósitos como substitutos aos materiais convencionais, como referido anteriormente, deve-se muito às melhorias obtidas nas suas propriedades tais como a rigidez, a resistência ao desgaste e à fadiga, a flexibilidade, boa condutividade, dependendo da combinação de materiais utilizados.

As principais desvantagens associadas a estes materiais resultam da complexidade da sua produção e dos elevados custos quando produzidos em pequenas quantidades.

2.2.2 Aplicações industriais

Atualmente os materiais compósitos tomam uma grande importância em grande parte dos produtos com que lidamos no quotidiano, ainda que existam indústrias que se destacam na utilização destes materiais. A indústria dos transportes domina quanto à utilização de compósitos, nomeadamente a indústria aeronáutica e aeroespacial que tiveram uma grande importância no crescente uso dos mesmos, sendo atualmente esta classe de materiais a mais utilizada no sector.

A figura 2.6 mostra uma clara tendência no aumento da utilização de materiais compósitos na composição de aviões comerciais, chegando estes nos dias de hoje a fazer parte de metade da composição total dos mesmos.

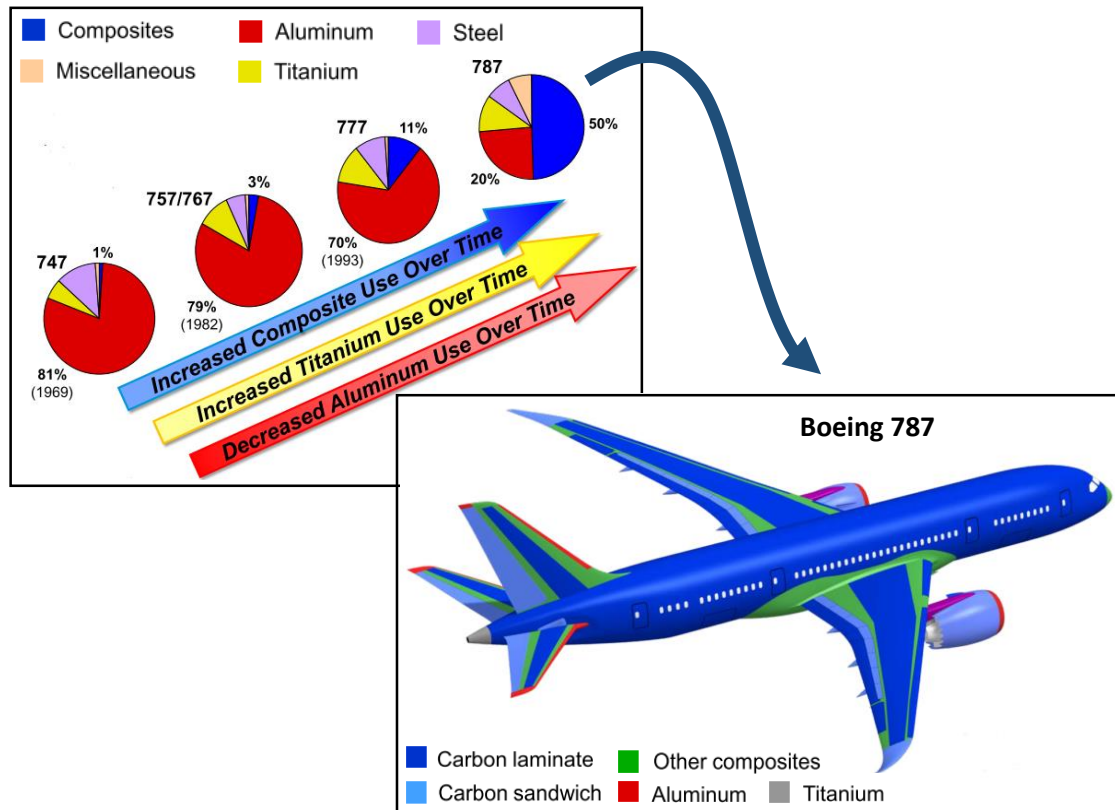


Figura 2.6 - Composição de um avião comercial, adaptado de Boeing, 2013.

A construção civil representa também uma larga quota da utilização de materiais compósitos, onde estes já são utilizados desde há muito tempo em elementos estruturais como é o caso das vigas em betão armado.

A indústria desportiva tem sofrido uma grande evolução ao longo dos anos, atualmente muitos dos produtos utilizados na prática de atividades desportivas são compostos por materiais compósitos. Graças às propriedades oferecidas por estes materiais, as condições para a prática de desporto são muito superiores em relação ao que eram em anos passados, pois atualmente o equipamento permite não só melhores desempenhos por parte dos atletas, como também uma maior segurança no desempenho de algumas atividades, como por exemplo nos desportos radicais. A sua utilização em artigos desportivos permite ainda obter um *design* mais atrativo devido à sua facilidade de moldagem em relação às ligas metálicas.

Os materiais compósitos têm ainda uma ampla gama de aplicações na indústria eletrónica e na nanotecnologia. Em suma, são uma classe de materiais que apresentam diferentes propriedades que são utilizadas em toda a indústria.

2.2.3 Microestrutura periódica

Num caso particular dos materiais compósitos existem os materiais de microestrutura periódica. Nesta dissertação é dada ênfase aos materiais porosos de microestrutura periódica, sendo estes constituídos por duas fases, sólido e vazio. Estes materiais são constituídos pela repetição de uma célula unitária em todas as direções espaciais, ver figura 2.7.

Estudos recentes provam o grande potencial que existe nestes materiais, tendo estes uma grande importância na área de investigação de materiais, ver Cadman *et al.*, (2013).

Estes materiais podem ser projetados de forma a obter propriedades elásticas pouco usuais nos materiais convencionais controlando o tipo de microestrutura presente nos mesmos. Em Andreassen *et al.*, (2014) é apresentado um método para projetar materiais com propriedades elásticas extremas (no limite do intervalo calculado por métodos analíticos). Para além de propriedades “extremas” e do grande espectro de funcionalidades, estes materiais podem também apresentar características excecionais que não estão presentes na natureza, denominados de meta materiais, ver Sigmund (2009).

Têm-se verificado avanços significativos no projeto de materiais multifuncionais de microestrutura periódica com variadas propriedades físicas com interesse prático, com o passar do tempo multiplicam-se os trabalhos publicados com o objetivo de obter estruturas otimizando propriedades elásticas ou térmicas, comprovando o quão ativa essa área de pesquisa tem sido. Em Challis *et al.*, (2012); Radman *et al.*, (2013), (2014); Yang *et al.*, (2013) são projetados materiais com maximização da rigidez elástica. Andreassen *et al.*, (2014); Radman *et al.*, (2013) apresentam materiais com coeficiente de poisson negativo (materiais auxéticos) que podem ser utilizados na engenharia em diversas aplicações (absorção de choques/energia mecânica, etc.). Outros materiais com diferentes propriedades têm sido abordados, como o projeto de materiais com maximização das frequências naturais (Zuo *et al.*, 2013), condutividade térmica (Radman *et al.*, 2014), permeabilidade do material (Challis *et al.*, 2012), materiais sem compressibilidade ou com compressibilidade negativa (Xie *et al.*, 2014) e ainda piezocompósitos (Vatanabe *et al.*, 2013). Materiais viscoelásticos são materiais que ao sofrerem deformações sofrem simultaneamente deformações elásticas e viscosas, estando também estes presentes nesta área de investigação, ver Andreassen *et al.*, (2014); Andreassen e Jensen, (2014); Chen e Liu, (2014).

A estrutura de coeficiente de Poisson negativo (material auxético) representada na figura 2.7, apresenta vantagens em relação aos materiais comuns (não auxéticos). Materiais auxéticos apresentam uma elevada resistência a forças tangenciais, grande tenacidade e boa absorção de vibrações, contudo, na produção destes materiais, é necessário que os mesmos tenham um grau de porosidade elevado, levando a que estes apresentem uma rigidez sempre inferior aos materiais comuns, sendo esta a grande limitação deste tipo de materiais.

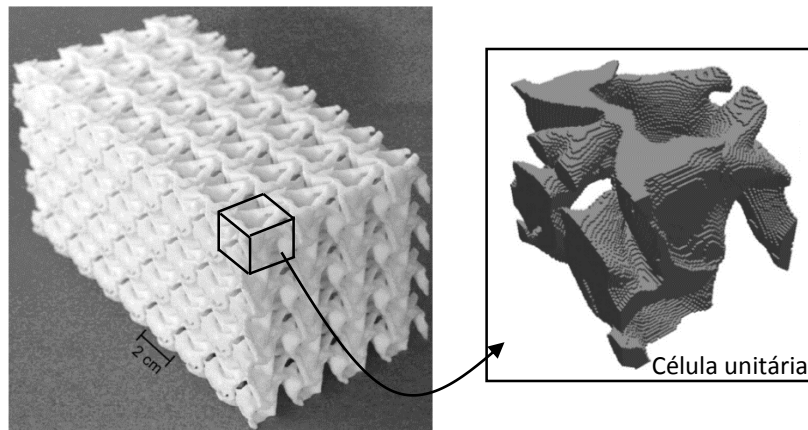


Figura 2.7 - Estrutura com coeficiente de Poisson negativo, adaptado de Andreassen *et al.*, (2014).

No ramo da biomecânica, materiais de microestrutura periódica, têm tido especial destaque, nomeadamente no projeto de *scaffolds* (suportes biomiméticos) Wieding *et al.*, (2013, 2014); Wu *et al.*, (2014), onde estes são utilizados na correção de defeitos do tecido ósseo causados por tumores, fraturas ou infeções. Para além das propriedades que podem apresentar os biomateriais, o projeto da microestrutura do material do *scaffold* permite também ter um controlo sobre a permeabilidade, por exemplo ver Coelho *et al.*, (2011), reforçando a sua grande funcionalidade no projeto de suportes biomiméticos onde a facilidade de penetração dos tecidos ósseos na estrutura é fundamental para uma efetiva regeneração do tecido ósseo. Na figura 2.8 encontra-se a ilustração de um implante ósseo (*scaffold*), onde é possível verificar a multifuncionalidade presente nestes materiais. Estes podem ser gerados para tomar formas geométricas muito complexas, adequando-se facilmente a qualquer posição, e ainda cumprindo as restrições de projeto para o qual foram otimizados.

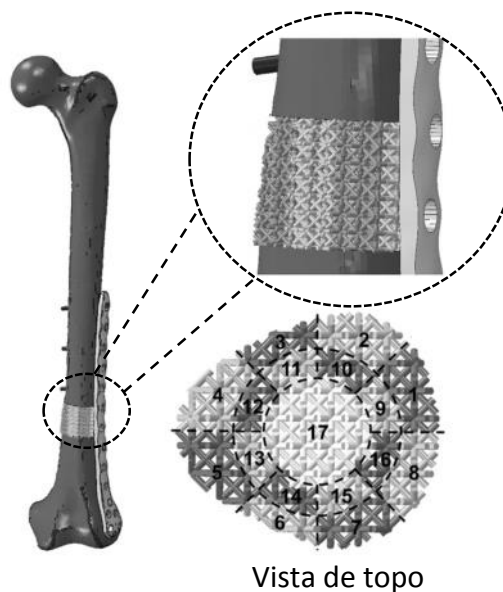


Figura 2.8 - Suporte biomimético para correção de defeito no fémur, adaptado de Wieding *et al.*, (2014).

3. Análise e otimização de material

3.1 Modelo de material

O modelo de material utilizado é um material compósito celular poroso, tridimensional de duas fases (sólido e vazio) e de microestrutura periódica, i.e., o meio heterogêneo é gerado através da repetição de uma célula de base unitária em todas as direções do espaço (esta representa a mais pequena periodicidade do domínio). Definem-se duas diferentes escalas, ilustradas na figura 3.1, a escala microscópica que tem como dimensão característica o comprimento linear d da célula de base, e a escala macroscópica que tem como dimensão característica o comprimento D do material compósito resultante, aqui assume-se que $D \gg d$.

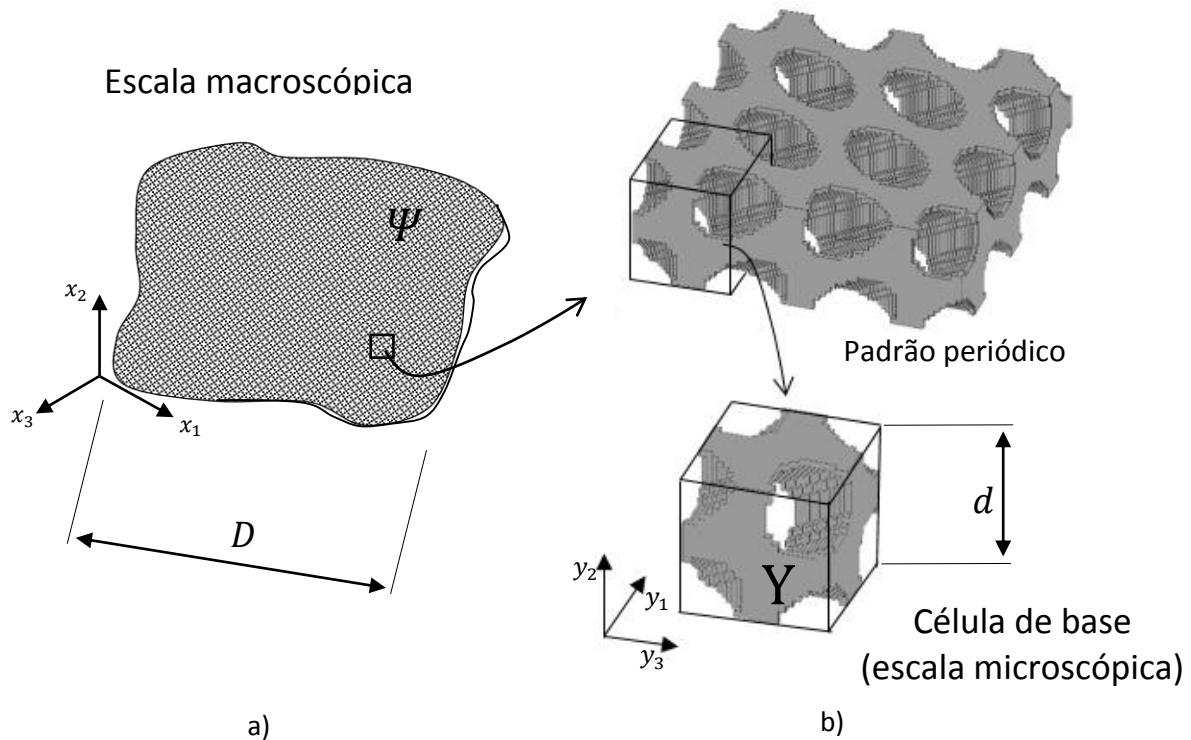


Figura 3.1 - Modelo de material: a) Domínio do material Ψ (escala macroscópica); b) Domínio da microestrutura Y (escala microscópica).

No modelo numérico da célula unitária foi utilizado uma malha de 20 elementos finitos para cada direção espacial num total de 8000 elementos hexaedros garantindo assim uma boa relação qualidade/custo computacional. A cada elemento está associada uma variável de densidade μ (ver figura 3.2), sendo a formulação do problema de otimização topológica apresentada na secção seguinte. As malhas utilizadas foram geradas através da utilização de comandos de programação em APDL, particularmente os comandos NGEN e EGEN do ANSYS. O tipo de elemento finito utilizado na modelação numérica do material foi o *Solid45*, do Ansys, definido por 8 nós, cada um com três graus de liberdade (translações nas direções x, y e z), resultando assim um total de 9261 nós e 27783 graus de liberdade.

No modelo numérico de material, existem dois módulos de rigidez distintos, pois tal como referido anteriormente, tratam-se de materiais compósitos porosos sendo que os elementos pertencentes à fase de vazio são também modelados ainda que com uma rigidez muito inferior à dos elementos da fase sólida. Este tipo de modelação foi necessário para que fosse possível estimar as propriedades das microestruturas porosas. A leitura das deformações/tensões dos elementos foi realizada nos pontos de Gauss (sem fazer extrapolações para os nós).

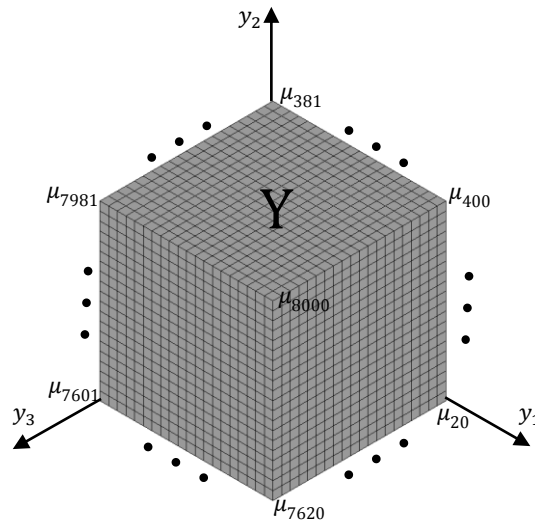


Figura 3.2 - Representação da malha de elementos finitos utilizada (domínio da célula unitária Y).

3.2 Problema de otimização

No presente trabalho as diferentes topologias das microestruturas obtidas foram otimizadas por um algoritmo que minimiza a função objetivo da densidade de energia de tensão (*compliance*) sujeita a constrangimentos de volume ou de permeabilidade. O constrangimento utilizado varia com o tipo de aplicação a que será dada a cada microestrutura. No caso de a densidade ser um parâmetro indispensável na função da microestrutura é utilizado um constrangimento de volume. Em aplicações onde a permeabilidade é essencial, como no projeto de suportes biomiméticos, então esse é o constrangimento utilizado. Para obter um bom compromisso entre estas propriedades conflitantes, permeabilidade (favorece porosidade) e rigidez (favorece a densidade), faz todo o sentido utilizar otimização topológica, conforme pode também ser visto em Challis *et al.*, (2012); Coelho *et al.*, (2011); Dias *et al.*, (2014); Guest e Prévost, (2006); Kang *et al.*, (2010); Xu e Cheng, (2010).

No projeto ótimo de material, a topologia da microestrutura de base (célula unitária) é obtida pela solução de um problema de distribuição de densidade μ . A variável de densidade μ apenas pode ter valor 1 ou 0, na versão discreta do problema de otimização de topologia em que 1 representa a presença de material e 0 a ausência do mesmo. Contudo, na resolução deste problema de distribuição de densidade, obtêm-se as denominadas “zonas cinzentas” onde a variável μ toma valores intermédios no caso da relaxação do problema discreto original ao caso contínuo. Como fisicamente as zonas cinzentas não têm significado, é utilizado o método do SIMP para que esses valores intermédios da variável μ convirjam para 0 e 1, podendo assim se obter a topologia final da microestrutura através da presença ou ausência de material no domínio da mesma.

O problema local do projeto de material anisotrópico é definido pela eq. (3.1) e uma breve descrição é dada em baixo, sendo que pode ser visto detalhadamente em Coelho *et al.*, (2011,2015); Guedes *et al.*, (2003).

$$\min_{\mu} \quad \frac{1}{2} C_{mnkl}^H(\mu) \bar{\sigma}_{mn} \bar{\sigma}_{kl} \quad (3.1)$$

Sujeito a:

$$K_{ij}^H(\mu) \geq k^*; i = j = 1, \dots, 3 \quad (3.2)$$

$$K_{ij}^H(\mu) = 0; i \neq j \quad e \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (3.3)$$

Em que μ é a densidade local que varia entre 0 e 1, que depende da variável de posição y na célula unitária de domínio de projeto Y , sendo a densidade global ρ ou a quantidade total de material utilizada estimada através da eq. (3.4).

$$\rho = \int_Y \mu(y) dY \quad (3.4)$$

A formulação do problema está direcionada para uma minimização da densidade de energia de tensão que é equivalente à minimização da *compliance* ou maximização da rigidez.

O tensor da tensão $\bar{\sigma}$ caracteriza o campo de tensões médias macroscópicas aplicadas ao compósito. C^H representa o tensor da compliance homogeneizado sendo este o inverso do tensor de rigidez homogeneizado E^H , que será descrito detalhadamente na secção 3.5.

Em relação às restrições do problema de otimização, estas forçam a que o tensor da permeabilidade seja diagonal e que em cada coeficiente da diagonal (que representam cada direção espacial) seja igual ou maior que um limite k^* . Desta forma obtém-se uma rede de poros que garantem uma permeabilidade mínima em todas as direções espaciais, sendo a medida de permeabilidade do material poroso dada pelo tensor homogeneizado K^H , ver Coelho (2009, 2011).

Outra restrição de projeto importante na otimização de estruturas, usado aqui em alternativa ao constrangimento de permeabilidade, é a definição da quantidade de material utilizado, limitando a solução a uma dada fração volúmica V^* da seguinte forma:

$$\int_Y \mu(y) dY \leq V^* \quad (3.5)$$

Desta forma a solução obtida no final da otimização contém uma percentagem de material em relação ao domínio de projeto definido inicialmente.

Em um problema de otimização topológica a análise de sensibilidades é um dos elementos chave para que a resolução desse problema seja eficiente. O principal objetivo desta análise é o de quantificar o modo como a alteração das variáveis de projeto afeta a função objetivo. Tal como visto anteriormente, no presente trabalho a variável de projeto é a densidade μ e a função objetivo é a densidade de energia de tensão.

O cálculo das sensibilidades pode ser resolvido de duas diferentes formas, ou numericamente através do método das diferenças finitas, ou através do cálculo analítico dos gradientes da função objetivo. O método numérico das diferenças finitas é de formulação e implementação simples em um algoritmo, no entanto, realiza aproximações de baixa precisão. Já o método analítico é preciso e permite obter valores de sensibilidade exatos, no entanto, a sua formulação é bastante complexa e difícil de implementar nos algoritmos de otimização. No algoritmo utilizado neste trabalho a análise de sensibilidades foi realizada através do cálculo dos gradientes da função objetivo analiticamente, consultar Bendsøe e Sigmund, (2003) para uma descrição detalhada deste processo.

Apesar de existirem várias metodologias de otimização, muitas vezes os algoritmos deparam-se com problemas sob a forma de instabilidades numéricas como é o caso do *checkerboard*. Este fenómeno consiste na formação de regiões onde os elementos sólidos intercalam com os elementos sem densidade (ou vazios), que faz lembrar um tabuleiro de xadrez, ver figura 3.3. Desta forma é criada uma rigidez artificial que é sobrestimada por modelos de elementos finitos com polinómios de baixo grau como é o caso do elemento hexaedro de 8 nós.



Figura 3.3 - Problema de *checkerboard*, adaptado de Bendsøe e Sigmund, (2003)

Uma forma de evitar o aparecimento de *checkerboard* consiste na utilização de filtros de sensibilidades. A utilização destes filtros leva a que a análise de sensibilidades de um determinado elemento k passe a ser feita através da média ponderada da sensibilidade desse mesmo elemento com as sensibilidades dos elementos que o rodeiam, ver eq. (3.6)

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial \rho_k} = \frac{1}{\rho_k \sum_{i=1}^N \hat{H}_i} \sum_{i=1}^N \hat{H}_i \rho_i \frac{\partial f}{\partial \rho_i} \quad (3.6)$$

em que N representa o número de elementos que compõem a malha e o fator de peso \hat{H}_i é estimado pela seguinte equação:

$$\widehat{H}_i = r_{min} - \text{dist}(k, i), \quad \{i \in N \mid \text{dist}(k, i) \leq r_{min}\}, k = 1, \dots, N \quad (3.7)$$

Onde $\text{dist}(k, i)$ é a distância do centro do elemento k (que está a ser filtrado) ao centro do elemento i (um dos elementos que o rodeiam). Desta forma quanto maior a distância $\text{dist}(k, i)$, menor o peso \widehat{H}_i do elemento i no cálculo das sensibilidades do elemento k .

O raio r_{min} define de forma indireta o número de elementos com que o cálculo da média das sensibilidades é realizado, ver ilustração na figura 3.4, onde os elementos cujo centro esteja abrangido pelo raio r_{min} são contabilizados no cálculo da média.

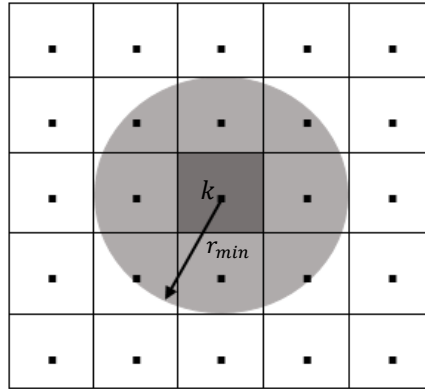


Figura 3.4 - Representação da vizinhança de um elemento k definida pelo r_{min}

O método das assíptotas móveis (MMA) é um algoritmo de programação matemática adequado à resolução de problemas de otimização estrutural desenvolvido por Svanberg, (1987). Este foi o método implementado no algoritmo de otimização utilizado na presente dissertação, onde o mesmo resolve um problema através de uma sequência de aproximações mais simples do problema original.

Admitindo uma função objetivo de n variáveis $\mathbf{x} = x_1, \dots, x_n$, a função que faz a aproximação em torno do ponto \mathbf{x}^K é definida pela seguinte equação:

$$F(\mathbf{x}) \approx F(\mathbf{x}^k) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{r_i^k}{U_i^k - x_i} + \frac{s_i^k}{x_i - L_i^k} \right) \quad (3.8)$$

Onde k é o número da presente iteração e i define a variável da função. Os parâmetros r_i^k e s_i^k são estimados da seguinte forma:

$$\text{Para } \frac{dF}{dx_i}(x^k) > 0 \quad \begin{aligned} r_i^k &= (U_i^k - x_i)^2 \frac{dF}{dx_i}(x^k) \\ s_i^k &= 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\text{Para } \frac{dF}{dx_i}(x^k) < 0 \quad \begin{aligned} r_i^k &= 0 \\ s_i^k &= -(x_i - L_i^k)^2 \frac{dF}{dx_i}(x^k) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Já os parâmetros U_i^k e L_i^k devem ser interpretados como assíntotas verticais que controlam o intervalo para o qual as aproximações de F podem gerar respostas razoáveis para o problema de otimização em causa. No algoritmo de otimização os valores de U_i^k e L_i^k são atualizados em cada iteração e o seu cálculo pode ser pormenorizadamente consultado em Svanberg, (1987).

3.3 Homogeneização

Os materiais compósitos apresentam heterogeneidades, e quando estes são sujeitos a campos de tensão ou deformação apresentam uma resposta de acordo com as propriedades elásticas que os caracterizam. A aplicação desses campos de tensão/deformação podem levar a fenómenos de cedência ou de rotura do material, e por essas razões é imprescindível conhecer as propriedades do material.

É possível através de modelos analíticos ou de modelos numéricos determinar essas propriedades, ainda que os modelos analíticos sejam mais utilizados para a resolução de problemas simples, neste caso particular para o cálculo de propriedades de materiais de geometrias simples. Já para materiais com geometrias complexas (de difícil resolução analítica) é comum recorrer-se a simulações e modelos numéricos (por exemplo métodos de elementos finitos) para efetuar o cálculo das propriedades elásticas. Dado que a precisão dos modelos numéricos é tanto maior quanto maior for a malha utilizada (melhor definição dos detalhes das microestruturas) para casos de geometria muito complexa a modelação numérica dos materiais fica de certa forma impossibilitada dado o custo de cálculo computacional exigido pela mesma, para além dos longos tempos de computação, ainda que utilizando *clusters* de computação paralela.

De forma a ultrapassar as limitações dos cálculos analíticos e numéricos é usual recorrer-se a metodologias de homogeneização. Estas metodologias são utilizadas para transformar um meio heterogéneo em um meio homogéneo com propriedades elásticas equivalentes. A figura 3.5 apresenta de forma esquemática um corpo Ψ^ε de microestrutura periódica (heterogéneo), com propriedades elásticas E_{ijkl}^ε substituído pelo processo de homogeneização por um corpo homogéneo Ψ com propriedades elásticas E_{ijkl}^H .

Este trabalho aplica a teoria da homogeneização para meios periódicos, todavia, sendo esta uma teoria de simplificação de cálculo, recorre a aproximações com uma precisão longe da oferecida por uma malha de elementos finitos muito refinada. Por essa razão é importante estimar de que forma o problema real se aproxima das hipóteses da homogeneização.

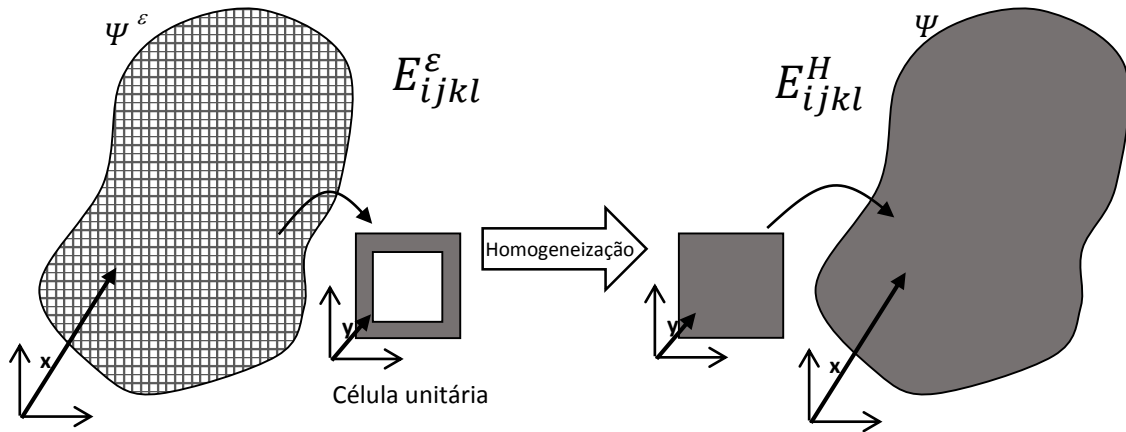


Figura 3.5 - Conceito de homogeneização para um material celular.

Esta teoria assume uma periodicidade infinita do meio heterogêneo, ou de outra forma, assume que a célula de base unitária com dimensão característica d é infinitesimal quando comparada com a dimensão característica D do domínio macroscópico, ou seja, $\varepsilon = \frac{d}{D} \rightarrow 0$ (ver figura 3.6; Guedes e Kikuchi, 1990). Resumidamente, a homogeneização assume o problema como adimensional, contudo, na realidade isso nunca se verifica e o estudo da presente dissertação procura verificar de que modo e em que condições esta aproximação é válida.

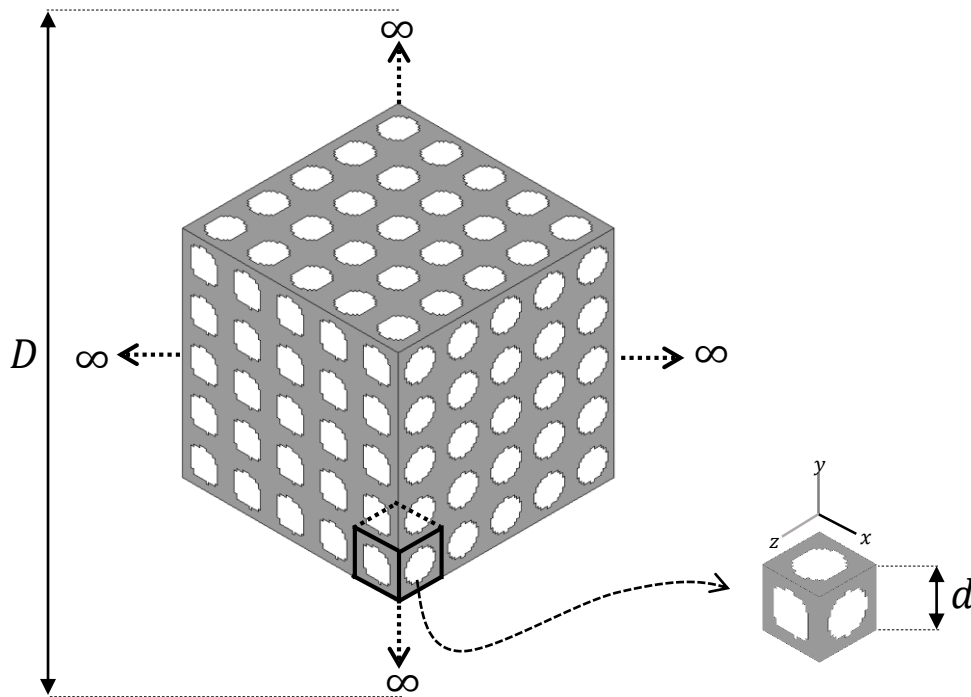


Figura 3.6 - Representação esquemática de um padrão periódico infinito gerado pela repetição da célula de base unitária nas três direções espaciais.

Outra hipótese assumida pela teoria da homogeneização é a existência de uma periodicidade infinita no domínio microscópico e no domínio macroscópico (ver figura 3.7), tal que qualquer propriedade ψ física ou geométrica é periódica se se verificar:

$$\mathbf{x} \in \Psi \text{ e } (\mathbf{x} + \mathbf{y}) \in \Psi \Rightarrow \psi(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \psi(\mathbf{x}) \quad (3.11)$$

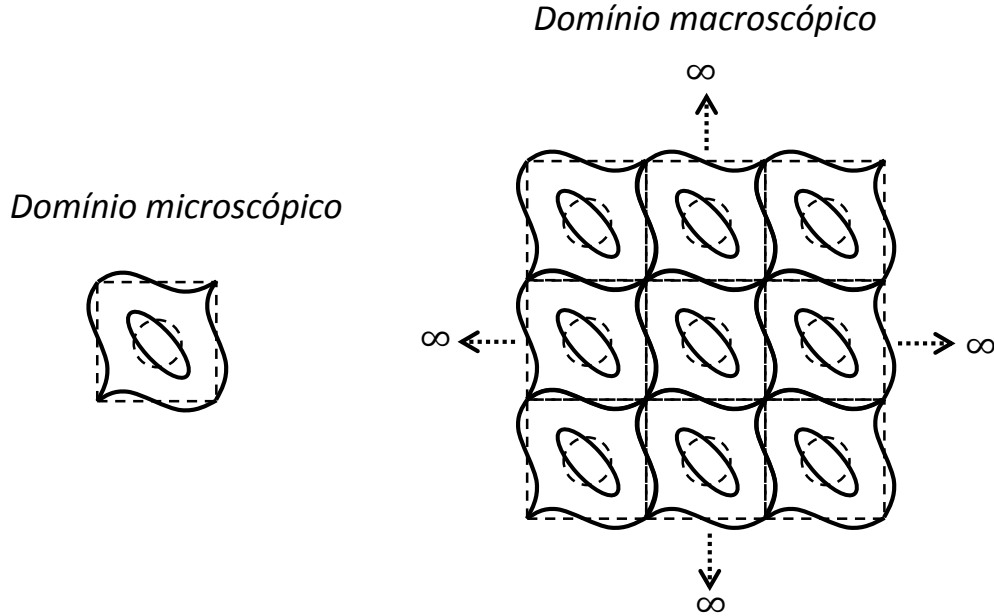


Figura 3.7 - Representação esquemática das condições de periodicidade no domínio microscópico e macroscópico.

O cálculo das propriedades homogeneizadas é realizado através da seguinte equação (Guedes e Kikuchi, 1990):

$$E_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_{\Psi} E_{pqrs} \left(\delta_{rk} \delta_{sm} - \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \right) \left(\delta_{pi} \delta_{qj} - \frac{\partial \chi_p^{ij}}{\partial y_q} \right) dY \quad (3.12)$$

Onde $|Y|$ representa o volume do domínio da célula unitária, δ o delta de Kronecker e χ^{km} são as deformações características da célula quando submetidas à aplicação de seis estados de tensão de teste unitário ($e_{rs}^{o(km)}$) e são solução da seguinte equação:

$$\int_{\Psi} E_{ijrs} \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_{\Psi} E_{ijrs} e_{rs}^{o(km)} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\Psi} \quad (3.13)$$

Onde E_{pqrs} é o tensor das propriedades elásticas calculado pelo modelo SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*). Este modelo utiliza variáveis contínuas e introduz uma penalização p de forma a orientar a solução para os valores discretos 0 e 1 da variável de densidade μ para cada elemento da malha de elementos finitos. O problema de otimização para

o domínio fixo é, tal como referido anteriormente, formulado para que este dependa continuamente da variável de projeto (densidade):

$$E_{pqrs}(y) = \mu(y)^p E_{ijkl}^0, \quad p > 1, \quad (3.14)$$

$$\int_Y \mu(y) dY \leq V^*; \quad 0 \leq \mu \leq 1, \quad y \in Y \quad (3.15)$$

Onde a densidade μ é a variável de projeto que é função da variável de posição y e E_{ijkl}^0 representa o tensor da elasticidade de um material base sólido e isotrópico, p é a constante de penalização do modelo adotado e V^* o limite superior para a fração volúmica de material disponível.

Segundo Bendsøe e Sigmund, (2003), para um problema com um constrangimento de volume ativo, $p \geq 3$ é necessário para uma convergência da variável densidade μ , levando a que o domínio Y seja caracterizado por regiões de $\mu = 1$ (material sólido) e $\mu = 0$ (material vazio/ausência de material).

O algoritmo de otimização utilizado no presente trabalho utiliza o método da homogeneização inversa (ver Bendsøe e Sigmund, 2003), partindo de uma topologia inicial da microestrutura e resolvendo o problema de homogeneização, caso o resultado não satisfaça um critério de convergência, altera-se a topologia e resolve-se novamente. Este procedimento é repetido até que a topologia obtida convirja, isto é, obtém-se o mínimo da densidade de energia de tensão ou compliance, ver fluxograma na figura 3.8.

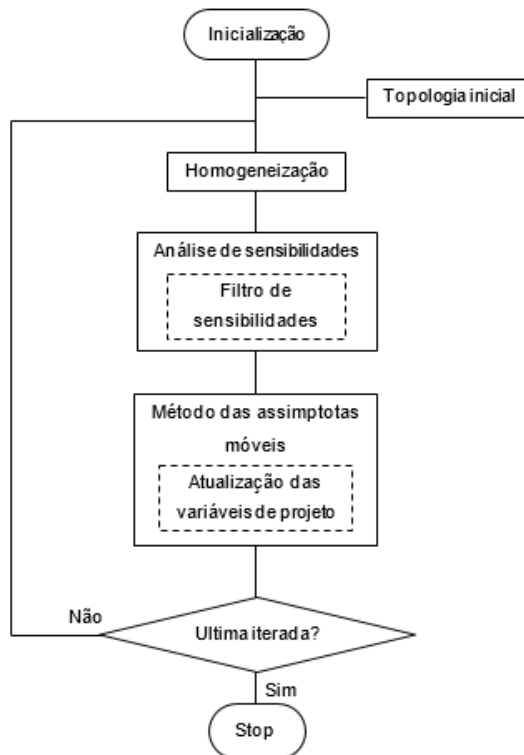


Figura 3.8 - Fluxograma do algoritmo de otimização utilizado no presente trabalho.

A figura 3.8 mostra o processo de otimização utilizado no presente trabalho de forma sucinta. Verifica-se que o número de iterações define o critério de paragem do algoritmo utilizado, este tem de ser suficientemente grande para que seja garantida a convergência da função objetivo. Poderia ter sido implementado outro critério de paragem, como o da convergência da função objetivo, ainda assim desta forma tem-se uma maior liberdade e controlo sobre o algoritmo de otimização e a convergência pode ser satisfeita igualmente.

3.4 Efeitos de escala

Na presente dissertação foi colocado em foco o estudo dos efeitos de escala ou o estudo da convergência das propriedades do material para os valores teóricos obtidos pelo método da homogeneização.

O fator de escala n é definido pelo quociente entre a dimensão da estrutura D gerada pela repetição da célula de base unitária e a dimensão dessa mesma célula d , i.e., $n = D/d$ (ver figura 3.6 e Pecullan, (1999)). Assumindo que o domínio do compósito Ψ é sempre um cubo unitário, $D = 1$, n representa o número de vezes que a célula unitária é repetida ao longo de cada eixo Cartesiano, sendo n^3 o número total de células que geram o domínio Ψ .

Tal como descrito na secção anterior, o tensor elástico homogeneizado E_{ijkl}^H é estimado assumindo um número infinito de repetição da célula unitária, $n \rightarrow \infty$, ou seja, é independente do fator de escala, no entanto, na prática isso não se verifica, sendo as propriedades elásticas da estrutura dependentes do número finito de repetições da célula de base. O estudo dos efeitos de escala na convergência das propriedades elásticas é fundamental para que possa ser feita uma validação dos resultados obtidos pela teoria da homogeneização. Ainda que exista um erro moderado entre os resultados obtidos para um número finito de repetições da célula de base unitária comparado com os estimados pelo método da homogeneização, sobretudo para um baixo número de repetições, é essencial conseguir quantificar esse mesmo erro.

Deste modo foi realizada uma comparação das propriedades elásticas homogeneizadas com as propriedades estimadas através da realização de ensaios mecânicos com modelos numéricos com diferentes números de repetição da célula unitária. Tal como representado na figura 3.9, neste trabalho o fator de escala n varia de 1 até 6:

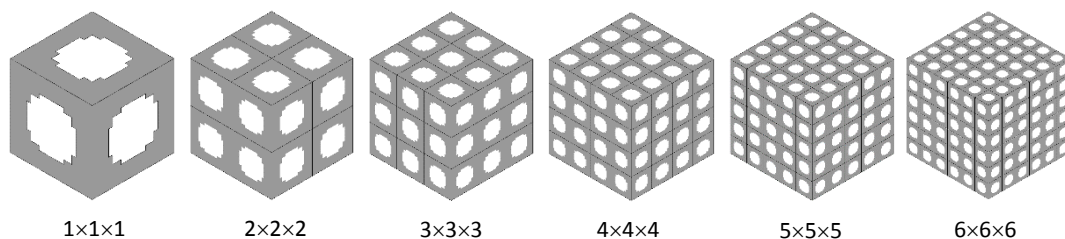


Figura 3.9 - Cubo unitário com $n \times n \times n$ repetições da célula unitária.

Ao serem utilizados modelos numéricos com um elevado número de repetições da célula de base, são atingidos os recursos computacionais máximos disponíveis, levando à utilização de um rácio $n_{m\acute{a}x} = 6$, pelo que o padrão $6 \times 6 \times 6$ foi o máximo possível de avaliar. Uma vez que cada microestrutura é composta por 8000 elementos, para um rácio de $n = 6$ são modelados um total de 1728000 elementos, percebendo-se assim o elevado custo computacional.

3.5 Tensores constitutivos

3.5.1 Tensor de rigidez

Um material diz-se anisotrópico quando apresenta diferentes propriedades num dado ponto quando solicitado em diferentes direções. Por sua vez, um material diz-se isotrópico se as suas propriedades são as mesmas em todas as direções.

A lei de *Hooke* descreve o comportamento elástico dos corpos. Esta relaciona as nove componentes de um estado de tensão com as nove componentes de um estado de deformação (Jones, 1975).

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl}\varepsilon_{kl} \quad i, j, k, l = 1, \dots, 3 \quad (3.16)$$

Onde ε_{kl} são as componentes do tensor das deformações, σ_{ij} são as componentes do tensor das tensões, e E_{ijkl} são as 81 coeficientes elásticas do tensor de quarta ordem que caracteriza o comportamento do material, contudo, existem simetrias no tensor tais que,

$$E_{ijkl} = E_{jikl} = E_{ijlk} = E_{klij} \quad (3.17)$$

e

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (3.18)$$

$$\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk} \quad (3.19)$$

Desta forma, o tensor elástico fica reduzido apenas a 21 coeficientes que são independentes e a eq. (3.16) pode ser expressa na forma matricial reduzida da seguinte forma:

$$\sigma_i = E_{ij}\varepsilon_j \quad i, j = 1, \dots, 6 \quad (3.20)$$

Aqui o tensor elástico, reduzido a 36 componentes, pode ser representado sob a forma de matriz:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & E_{14} & E_{15} & E_{16} \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} & E_{24} & E_{25} & E_{26} \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} & E_{34} & E_{35} & E_{36} \\ E_{41} & E_{42} & E_{43} & E_{44} & E_{45} & E_{46} \\ E_{51} & E_{52} & E_{53} & E_{54} & E_{55} & E_{56} \\ E_{61} & E_{62} & E_{63} & E_{64} & E_{65} & E_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

Para fazer corresponder as componentes apresentadas na forma reduzida (notação de Voigt-Kelvin) às componentes do tensor elástico efetuam-se as operações seguintes:

$$1 \rightarrow 11 \quad 2 \rightarrow 22 \quad 3 \rightarrow 33 \quad 4 \rightarrow 12 \quad 5 \rightarrow 23 \quad 6 \rightarrow 13$$

Para as componentes da tensão e da deformação a explicação da notação utilizada está presente na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Comparação entre a notação do tensor e da forma reduzida (matricial).

Tensão (σ)		Deformação (ε)	
Notação do Tensor	Notação reduzida	Notação do Tensor	Notação reduzida
σ_{11}	σ_1	ε_{11}	ε_1
σ_{22}	σ_2	ε_{22}	ε_2
σ_{33}	σ_3	ε_{33}	ε_3
$\tau_{12} = \sigma_{12}$	σ_4	$\gamma_{12} = 2\varepsilon_{12}$	ε_4
$\tau_{23} = \sigma_{23}$	σ_5	$\gamma_{23} = 2\varepsilon_{23}$	ε_5
$\tau_{13} = \sigma_{13}$	σ_6	$\gamma_{13} = 2\varepsilon_{13}$	ε_6

Em que,

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u}{\partial x} ; \varepsilon_{22} = \frac{\partial v}{\partial y} ; \varepsilon_{33} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.22)$$

$$\gamma_{12} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} ; \gamma_{23} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} ; \gamma_{13} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \quad (3.23)$$

onde u , v e w são os deslocamentos segundo a direção x , y e z , respetivamente. Assim, a distorção γ_{ij} pode ser apresentada em função das deformações de corte da seguinte forma:

$$\gamma_{ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji} = 2\varepsilon_{ij} \quad \text{para } i \neq j \quad (3.24)$$

As 36 componentes do tensor elástico E_{ijkl} são apresentadas sob a forma de matriz da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{12} \\ \tau_{23} \\ \tau_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{1111} & E_{1122} & E_{1133} & E_{1112} & E_{1123} & E_{1113} \\ E_{2211} & E_{2222} & E_{2233} & E_{2212} & E_{2223} & E_{2213} \\ E_{3311} & E_{3322} & E_{3333} & E_{3312} & E_{3323} & E_{3313} \\ E_{1211} & E_{1222} & E_{1233} & E_{1212} & E_{1223} & E_{1213} \\ E_{2311} & E_{2322} & E_{2333} & E_{2312} & E_{2323} & E_{2313} \\ E_{1311} & E_{1322} & E_{1333} & E_{1312} & E_{1323} & E_{1313} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{13} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

A presença das distorções, γ_{kl} na eq. (3.25) é justificada com a resolução da eq. (3.16) tal que para i e j igual a 1:

$$\sigma_{11} = E_{11kl}\varepsilon_{kl} = E_{1111}\varepsilon_{11} + E_{1122}\varepsilon_{22} + E_{1133}\varepsilon_{33} + E_{1112}\varepsilon_{12} + E_{1123}\varepsilon_{23} + E_{1113}\varepsilon_{13} + E_{1121}\varepsilon_{21} + E_{1132}\varepsilon_{32} + E_{1131}\varepsilon_{31} \quad (3.26)$$

Dadas as simetrias apresentadas nas eq. (3.17), (3.18) e (3.19),

$$\sigma_{11} = E_{1111}\varepsilon_{11} + E_{1122}\varepsilon_{22} + E_{1133}\varepsilon_{33} + 2E_{1112}\varepsilon_{12} + 2E_{1123}\varepsilon_{23} + 2E_{1113}\varepsilon_{13} \quad (3.27)$$

e uma vez que $\gamma_{ij} = 2\varepsilon_{ij}$, (eq. 3.24):

$$\sigma_{11} = E_{1111}\varepsilon_{11} + E_{1122}\varepsilon_{22} + E_{1133}\varepsilon_{33} + E_{1112}\gamma_{12} + E_{1123}\gamma_{23} + E_{1113}\gamma_{13} \quad (3.28)$$

No caso da tensão de corte para $i = 1$ e $j = 2$:

$$\begin{aligned} \sigma_{12} = E_{12kl}\varepsilon_{kl} = & E_{1211}\varepsilon_{11} + E_{1222}\varepsilon_{22} + E_{1233}\varepsilon_{33} + E_{1212}\varepsilon_{12} + E_{1223}\varepsilon_{23} \\ & + E_{1213}\varepsilon_{13} + E_{1221}\varepsilon_{21} + E_{1232}\varepsilon_{32} + E_{1231}\varepsilon_{31} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Tirando partido das simetrias e simplificando vem que:

$$\sigma_{12} = E_{1211}\varepsilon_{11} + E_{1222}\varepsilon_{22} + E_{1233}\varepsilon_{33} + 2E_{1212}\varepsilon_{12} + 2E_{1223}\varepsilon_{23} + 2E_{1213}\varepsilon_{13} \quad (3.30)$$

e por fim,

$$\sigma_{12} = E_{1211}\varepsilon_{11} + E_{1222}\varepsilon_{22} + E_{1233}\varepsilon_{33} + E_{1212}\gamma_{12} + E_{1223}\gamma_{23} + E_{1213}\gamma_{13} \quad (3.31)$$

Resolvendo as equações anteriores de forma semelhante para os restantes valores de i e j , justifica-se o aspeto da eq. (3.25).

Para materiais elásticos, o trabalho incremental por unidade de volume é

$$dW = \sigma_i d\varepsilon_i \quad (3.32)$$

Pela eq.(3.20),

$$dW = E_{ij}\varepsilon_j d\varepsilon_i \quad (3.33)$$

e integrando em todas as deformações, obtém-se o trabalho por unidade de volume, ou a densidade de energia de deformação:

$$W = \frac{1}{2} E_{ij}\varepsilon_i\varepsilon_j \quad (3.34)$$

A lei de Hooke pode ser derivada da eq. (3.33):

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_j \partial \varepsilon_i} = E_{ji} \quad (3.35)$$

Uma vez que a ordem de integração é indiferente, $E_{ij} = E_{ji}$, verifica-se as simetrias dos tensores apresentados pelas eq. (3.17), (3.18) e (3.19).

3.5.2 Tensor de flexibilidade

O tensor de flexibilidade ou da *compliance* é o inverso do tensor de rigidez, ou seja, $C_{ijkl} = E_{ijkl}^{-1}$. Dessa forma, a lei de Hooke pode ser escrita da seguinte forma:

$$\varepsilon_{ij} = C_{ijkl}\sigma_{kl} \quad i, j, k, l = 1, \dots, 3 \quad (3.36)$$

A par do tensor de rigidez, o tensor de flexibilidade também apresenta simetrias tal que,

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij} \quad (3.37)$$

reduzindo o tensor a apenas 21 componentes independentes. Contudo, a representação da eq.(3.36) sob a forma reduzida de matrizes necessita de algumas correções face à apresentada anteriormente (eq. 3.25):

Pela eq. (3.36), para i e j igual a 1:

$$\varepsilon_{11} = C_{11kl}\sigma_{kl} = C_{1111}\sigma_{11} + C_{1122}\sigma_{22} + C_{1133}\sigma_{33} + C_{1112}\sigma_{12} + C_{1123}\sigma_{23} + C_{1113}\sigma_{13} + C_{1121}\sigma_{21} + C_{1132}\sigma_{32} + C_{1131}\sigma_{31} \quad (3.38)$$

Dadas as simetrias apresentadas pelas eq. (3.18), (3.19) e (3.37), vem que:

$$\varepsilon_{11} = C_{1111}\sigma_{11} + C_{1122}\sigma_{22} + C_{1133}\sigma_{33} + 2C_{1112}\sigma_{12} + 2C_{1123}\sigma_{23} + 2C_{1113}\sigma_{13} \quad (3.39)$$

A deformação tangencial, para ($i = 1$ e $j = 2$) vem:

$$\varepsilon_{12} = C_{12kl}\sigma_{kl} = C_{1211}\sigma_{11} + C_{1222}\sigma_{22} + C_{1233}\sigma_{33} + C_{1212}\sigma_{12} + C_{1223}\sigma_{23} + C_{1213}\sigma_{13} + C_{1221}\sigma_{21} + C_{1232}\sigma_{32} + C_{1231}\sigma_{31} \quad (3.40)$$

Simplificando,

$$\varepsilon_{12} = C_{1211}\sigma_{11} + C_{1222}\sigma_{22} + C_{1233}\sigma_{33} + 2C_{1212}\sigma_{12} + 2C_{1223}\sigma_{23} + 2C_{1213}\sigma_{13} \quad (3.41)$$

Com a utilização da eq. (3.24):

$$\gamma_{12} = 2C_{1211}\sigma_{11} + 2C_{1222}\sigma_{22} + 2C_{1233}\sigma_{33} + 4C_{1212}\sigma_{12} + 4C_{1223}\sigma_{23} + 4C_{1213}\sigma_{13} \quad (3.42)$$

Recorrendo ao mesmo processo para a resolução das equações anteriores para os restantes valores de i e j , verifica-se a presença de constantes que se multiplicam por determinados coeficientes do tensor de flexibilidade quando apresentado na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 2C_{1112} & 2C_{1123} & 2C_{1113} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & 2C_{2212} & 2C_{2223} & 2C_{2213} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & 2C_{3312} & 2C_{3323} & 2C_{3313} \\ 2C_{1211} & 2C_{1222} & 2C_{1233} & 4C_{1212} & 4C_{1223} & 4C_{1213} \\ 2C_{2311} & 2C_{2322} & 2C_{2333} & 4C_{2312} & 4C_{2323} & 4C_{2313} \\ 2C_{1311} & 2C_{1322} & 2C_{1333} & 4C_{1312} & 4C_{1323} & 4C_{1313} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{12} \\ \tau_{23} \\ \tau_{13} \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

3.5.3 Classes de simetria do tensor

Os materiais podem ser classificados segundo o seu estado de anisotropia. A figura 3.10 apresenta a hierarquia entre classes de simetria (por intermédio das setas) e a número de planos suficientes para definir as mesmas.

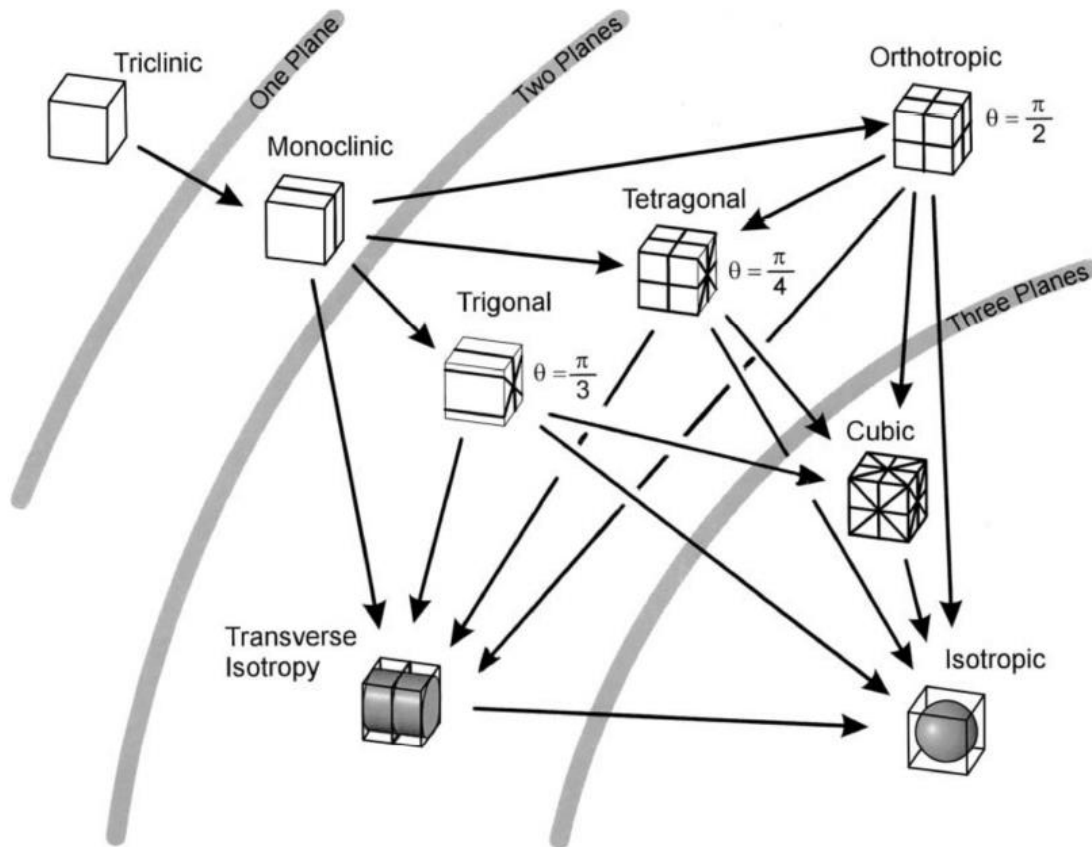


Figura 3.10 - Hierarquia das classes de simetria e o número de planos suficientes para a definição das mesmas (Chadwick *et al.*, 2001).

De seguida são expostos os diferentes aspetos que o tensor elástico apresenta para os diferentes casos de simetria de material (Bohlke e Bruggemann, 2001):

- **Simetria triclinica:**

Este representa o estado “máximo” de anisotropia, ou seja, não existe qualquer plano de simetria de material e o número de coeficientes independentes do tensor elástico é 21. Deste modo o tensor na forma matricial para esta classe de simetria de material toma a seguinte forma:

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & E_{14} & E_{15} & E_{16} \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} & E_{24} & E_{25} & E_{26} \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} & E_{34} & E_{35} & E_{36} \\ E_{41} & E_{42} & E_{43} & E_{44} & E_{45} & E_{46} \\ E_{51} & E_{52} & E_{53} & E_{54} & E_{55} & E_{56} \\ E_{61} & E_{62} & E_{63} & E_{64} & E_{65} & E_{66} \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

- **Simetria monoclinica:**

Quando existe um plano de simetria de material, este é denominado de monoclinico ou de simetria monoclinica. Utilizando o sistema de coordenadas Cartesianas (x, y, z) , se o plano de simetria é $z = 0$, o tensor de elasticidade toma a seguinte forma:

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & E_{16} \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} & 0 & 0 & E_{26} \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} & 0 & 0 & E_{36} \\ 0 & 0 & 0 & E_{44} & E_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{54} & E_{55} & 0 \\ E_{61} & E_{62} & E_{63} & 0 & 0 & E_{66} \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

Neste caso, dada a simetria do tensor ($E_{ij} = E_{ji}$), existem apenas 13 constantes elásticas independentes.

- **Simetria ortotrópica ou rômica:**

No caso de existirem três planos ortogonais de simetria das propriedades do material, o número de constantes elásticas independentes é reduzido para 9 e esses materiais são conhecidos como ortotrópicos ou de simetria rômica. Neste caso o tensor de elasticidade toma a forma apresentada de seguida:

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} & 0 & 0 & 0 \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{66} \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

- **Simetria trigonal:**

Com o mesmo número de planos de simetria que os materiais ortotrópicos, os materiais de simetria trigonal diferem destes uma vez que neste caso os planos de simetria não são ortogonais.

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & E_{14} & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{11} & E_{13} & -E_{14} & 0 & 0 \\ E_{31} & E_{31} & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ E_{41} & -E_{41} & 0 & E_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{44} & E_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{41} & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

Neste caso, existem apenas 6 componentes independentes do tensor elástico.

- **Simetria tetragonal:**

Quando existem cinco planos de simetria de propriedades do material o número de constantes elásticas independentes é reduzido apenas para 6 e o tensor toma a forma seguinte:

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{11} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{31} & E_{31} & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{66} \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

- **Simetria transversalmente isotrópica ou hexagonal:**

Para esta classe de simetria de material existe um plano interior ao material em que todas as direções contidas nesse plano são elasticamente equivalentes entre si (plano de isotropia). Desta forma são 5 as componentes independentes do tensor elástico, e se o plano de isotropia for o plano ortogonal à direção z do referencial cartesiano (x, y, z) , o tensor é apresentado toma a forma seguinte:

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{11} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{31} & E_{31} & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

- **Simetria cúbica:**

Para o caso de existirem 9 planos de simetria de material existem 3 componentes independentes do tensor de elasticidade como apresentado de seguida:

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{12} & 0 & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{11} & E_{12} & 0 & 0 & 0 \\ E_{31} & E_{31} & E_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{44} \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

- **Simetria isotrópica:**

Num material isotrópico existem infinitos planos de simetria de material, reduzindo para apenas para 2 as constantes elásticas independentes, uma que caracteriza o material segundo as direções longitudinais (x, y, z) e outra segundo os planos de corte (xy, yz, xz) .

$$E_{ij} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{12} & 0 & 0 & 0 \\ E_{12} & E_{11} & E_{12} & 0 & 0 & 0 \\ E_{12} & E_{12} & E_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(E_{11} - E_{12}) \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

Neste caso particular, a eq. (3.16) pode ser apresentada da seguinte forma:

$$\sigma_{ij} = [\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})] \varepsilon_{kl} \quad (3.52)$$

Onde λ e μ são as constantes elásticas de Lamé e δ_{ij} é o delta de Kronecker. As constantes de Lamé estão relacionadas com o módulo de corte G , o módulo de Young E e o coeficiente de Poisson ν da seguinte forma:

$$\mu \equiv G = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (3.53)$$

Pode-se agora reescrever a matriz dos coeficientes elásticos em função das constantes de Lamé:

$$E = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

De referir apenas que também é possível para materiais anisotrópicos apresentar a lei de Hooke em função das constantes de Lamé, contudo, no âmbito desta dissertação não faria sentido uma extensa abordagem sobre o tema, ainda que este deva ser consultado em Jones, (1975); Mase e Mase, (1992); Reddy, (1997).

A tabela 3.2 faz uma síntese em relação ao número de planos de simetria de um dado material e o número de componentes independentes do tensor elástico que caracterizam esse material.

Tabela 3.2 - Número de planos de simetria e componentes independentes para diferentes casos de simetria.

Tipo de simetria	Nº de planos de simetria	Nº de componentes independentes
Triclínica	0	21
Monoclínica	1	13
Ortotrópica	3	9
Trigonal	3	6
Tetragonal	5	6
Hexagonal	$1+\infty$	5
Cúbica	9	3
Isotrópica	∞	2

3.6 Medidas de anisotropia

De forma a quantificar o quão anisotrópico é um material, apresenta-se no capítulo 5 (resultados) representações gráficas obtidas pela rotação do tensor da *compliance* homogeneizado segundo a eq. (3.55). A cada rotação a componente $1/C_{ijkl}^H$ corresponde à rigidez do material nessa mesma direção e é usada para gerar essas mesmas representações, ver Bohlke e Bruggemann, (2001).

$$C_{ijkl}^H = R_{im}R_{jn}R_{kp}R_{lq}C_{mnpq}^H \quad (3.55)$$

A matriz de rotação \mathbf{R} é obtida através do produto matricial de três rotações elementares em termos dos ângulos de Euler, θ_i :

$$R_{ij}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_1) & \sin(\theta_1) \\ 0 & -\sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_2) & 0 & \sin(\theta_2) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta_2) & 0 & \cos(\theta_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_3) & \sin(\theta_3) & 0 \\ -\sin(\theta_3) & \cos(\theta_3) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

Considerando um referencial cartesiano $OX_1X_2X_3$, a primeira matriz corresponde a uma rotação de θ_1 em torno do eixo x_1 , a segunda a uma rotação de θ_2 em torno de x_2 , e a terceira a uma rotação de θ_3 em torno de x_3 .

De forma a complementar as representações gráficas descritas anteriormente, é também utilizado um parâmetro adimensional \mathcal{A} que quantifica a anisotropia de material, ver Challis *et al.*, (2008). Esta medida é interpretada como a “distância” entre o tensor da elasticidade E_{ijkl}^* e o mais próximo tensor da elasticidade isotrópico $E_{ijkl}^{*,iso}$. Este parâmetro toma valores entre 0 (isotrópico) e 2 (obtido em uma das topologias selecionadas neste trabalho).

$$\mathcal{A} = \sqrt{\frac{(E_{ijkl}^* - E_{ijkl}^{*,iso})(E_{ijkl}^* - E_{ijkl}^{*,iso})}{E_{ijkl}^{*,iso} E_{ijkl}^{*,iso}}} \quad (3.57)$$

O tensor isotrópico $E_{ijkl}^{*,iso}$ é definido a partir dos invariantes do tensor da elasticidade E_{ijkl}^* , q^* e u^* , respetivamente o módulo de compressibilidade e o módulo de corte, definidos nas eq. (3.58) e (3.59), respetivamente:

$$q^* = \frac{1}{9} E_{ii jj}^* \quad (3.58)$$

$$u^* = \frac{1}{20} (E_{ij ij}^* + E_{ij ji}^*) - \frac{1}{30} E_{ij ij}^* \quad (3.59)$$

3.7 Energia elástica

A densidade de energia elástica de deformação ou de tensão, ou energia armazenada por unidade de volume, é um escalar que quantifica a energia armazenada pelo sistema quando este é submetido a um estado de deformação ou de tensão. Em regime elástico quando a carga é removida, a energia de deformação é liberta gradualmente enquanto o sistema volta à sua forma inicial.

Grande parte dos trabalhos publicados de efeitos de escala abordam o tema da convergência da energia Pecullan, (1999); Xie *et al.*, (2012); Zuo *et al.*, (2013). Por exemplo, Pecullan, (1999) realizou uma comparação da convergência da energia entre diferentes condições de ensaio, nomeadamente as condições de Dirichlet e Neumann, apresentadas no capítulo 4 desta dissertação. Segundo este estudo as condições de Dirichlet sobrestimam o valor da energia enquanto pelas condições de Neumann esse valor é subestimado, tal como apresentado na eq. (3.60):

$$\mathbf{E}^{N(1)} \leq \mathbf{E}^{N(2)} \leq \mathbf{E}^{N(3)} \leq \dots \leq \mathbf{E}^{N(\infty)} \leq \mathbf{E}^* \leq \mathbf{E}^{D(\infty)} \leq \dots \leq \mathbf{E}^{D(3)} \leq \mathbf{E}^{D(2)} \leq \mathbf{E}^{D(1)} \quad (3.60)$$

Onde \mathbf{E}^N e \mathbf{E}^D representa o tensor elástico estimado com a utilização das condições de Neumann e de Dirichlet respetivamente. Já a numeração presente nos mesmos representa o fator de escala n ($n = 1, 2, 3, \dots, \infty$). A eq. (3.60) não deve ser interpretada como uma comparação individual dos coeficientes do tensor elástico com a alteração do fator de escala n . Para uma correta interpretação das presentes desigualdades considere-se dois tensores elásticos \mathbf{A} e \mathbf{B} tal que,

$$\mathbf{B} - \mathbf{A} \geq 0 \text{ é equivalente a } \mathbf{e} : (\mathbf{B} - \mathbf{A}) : \mathbf{e} \geq 0, \forall \mathbf{e}, \quad (3.61)$$

onde \mathbf{e} é um qualquer tensor simétrico de segunda ordem.

Por exemplo, \mathbf{e} pode ser igualado ao tensor macroscópico das deformações que pode ser estimado através da seguinte equação:

$$\bar{\epsilon} = \mathbf{C}^H(\mu^*)\bar{\sigma} \quad (3.62)$$

Onde $\mathbf{C}^H(\mu^*)$ representa o tensor homogeneizado da compliance da topologia ótima μ^* , solução do problema de otimização em estudo (eq. 3.1). Desta forma, a eq. (3.60) faz a comparação entre as densidades de energia de deformação. Tal como referido anteriormente, é esperado que a densidade de energia de deformação estimada através da utilização das condições de Dirichlet $\bar{\epsilon}\mathbf{E}^D\bar{\epsilon}$ tenha uma convergência sobrestimando o resultado homogeneizado, enquanto a convergência obtida através da utilização das condições de Neumann $\bar{\epsilon}\mathbf{E}^N\bar{\epsilon}$ será feita subestimando esse mesmo resultado com o aumento do fator de escala n .

Dado que $\mathbf{C} = \mathbf{E}^{-1}$, a desigualdade apresentada na eq. (3.60) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{C}^{D(1)} \leq \mathbf{C}^{D(2)} \leq \mathbf{C}^{D(3)} \leq \dots \leq \mathbf{C}^{D(\infty)} \leq \mathbf{C}^* \leq \mathbf{C}^{N(\infty)} \leq \dots \leq \mathbf{C}^{N(3)} \leq \mathbf{C}^{N(2)} \leq \mathbf{C}^{N(1)} \quad (3.63)$$

Da mesma forma da eq. (3.60), esta desigualdade deve ser interpretada através da eq. (3.61), ainda que agora o tensor arbitrário ϵ é igual ao tensor macroscópico das tensões $\bar{\sigma}$ da eq. (3.1).

Consequentemente, desta forma a densidade de energia de tensão estimada com a utilização das condições de Dirichlet, $\bar{\sigma}\mathbf{C}^D\bar{\sigma}$, converge subestimando o resultado homogeneizado, enquanto utilizando as condições de Neumann $\bar{\sigma}\mathbf{C}^N\bar{\sigma}$ a convergência obtida sobrestima o valor homogeneizado, com o aumento do fator de escala n .

O valor da densidade de energia de deformação é igual ao valor da densidade de energia de tensão, daí que $\bar{\epsilon}\mathbf{E}^H\bar{\epsilon} = \bar{\sigma}\mathbf{C}^H\bar{\sigma}$.

4. Caracterização de propriedades mecânicas

O presente capítulo no decorrer deste trabalho foi fundamental dado que todos os resultados obtidos têm como base a realização de ensaios com diferentes condições fronteira que aqui estão apresentadas.

Os ensaios realizados seguem não só modelos teóricos (normalizados) como também foi produzida uma abordagem no sentido mais prático de forma a poderem ser utilizados na engenharia.

Do ponto de vista computacional a modelação numérica dos ensaios foi realizada em linguagem APDL, no entanto, dada a carga computacional exigida para a realização dos ensaios foi necessário garantir que os algoritmos utilizados fossem bastante eficientes de forma a não serem atingidos os limites computacionais disponíveis.

4.1 Ensaios normalizados

4.1.1 Condições de Dirichlet

Os ensaios realizados com a utilização das condições de Dirichlet, segundo Zohdi e Wriggers, (2004), seguem as seguintes condições:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x})|_{\partial\psi} = \boldsymbol{\Theta}^i \cdot \mathbf{x}|_{\partial\psi} \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.1)$$

onde

$$\boldsymbol{\Theta}^i = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta \\ 0 & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

e $\partial\psi$ é a fronteira do material, \mathbf{u} é o vetor do deslocamento, \mathbf{x} é o vetor de posição espacial e β é uma constante. O índice i no tensor $\boldsymbol{\Theta}$ significa a realização dos seis ensaios fundamentais para a determinação das propriedades elásticas do material, sendo estes divididos em três ensaios longitudinais (nas direções x , y , z) e três ensaios de corte (nos planos xy , yz , xz).

Por exemplo, para um ensaio longitudinal, para $i = 1$:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Logo,

$$u_1 = \beta x_1; \quad u_2 = 0; \quad u_3 = 0 \quad (4.4)$$

verificando-se a aplicação de um deslocamento na direção u_1 linearmente dependente da coordenada de posição x_1 . Os deslocamentos nas restantes direções são nulos.

Dado que

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.5)$$

vem,

$$\varepsilon_{11} = \beta \quad (4.6)$$

o que significa que é aplicada uma deformação constante nos elementos nos ensaios longitudinais.

No caso de um ensaio de corte, para $i = 4$:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Logo,

$$u_1 = \beta x_2; \quad u_2 = \beta x_1; \quad u_3 = 0 \quad (4.8)$$

verificando-se a aplicação de deslocamentos na direção u_1 e u_2 linearmente dependentes da coordenada de posição x_1 e x_2 respetivamente. O deslocamento na direção u_3 é nulo.

Pela eq. (4.5),

$$\varepsilon_{12} = \frac{1}{2}(\beta + \beta) = \beta \quad (4.9)$$

Pela eq. (4.9), verifica-se que nos ensaios de corte é aplicada uma deformação de corte constante nos elementos.

Na figura 4.1 está esquematicamente representado a aplicação destas condições num domínio bidimensional para uma melhor interpretação das mesmas. Na figura 4.1a e 4.1b está representado respetivamente o ensaio na direção longitudinal y e o ensaio de corte xy , de acordo com a eq. (4.1).

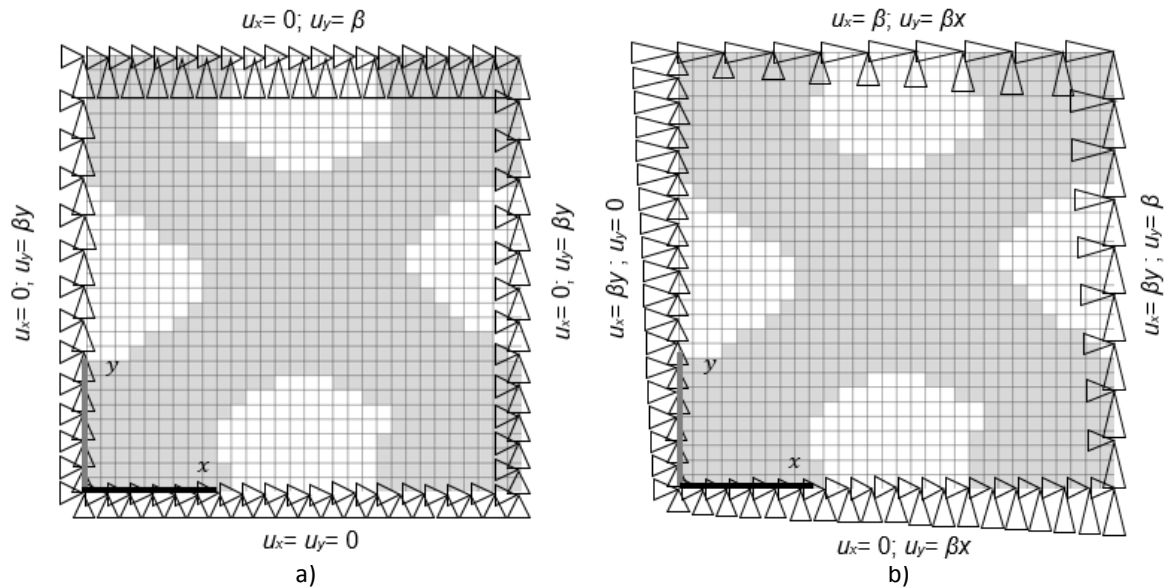


Figura 4.1 - Testes numéricos nas condições de Dirichlet (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;

Com a aplicação das condições fronteira de Dirichlet, estas permitem estimar de forma direta o tensor de rigidez do material, E^D . A tensão e a deformação média, respetivamente $\langle \sigma \rangle$ e $\langle \varepsilon \rangle$, são calculadas através da eq. (4.10) (média volúmica) ao longo de todos os elementos da malha, onde ambas as fases são modeladas (sólido e vazio) e para cada um dos seis ensaios.

$$\langle \bullet \rangle_\Psi = \frac{\int_\Psi \bullet d\Psi}{|\Psi|} \quad (4.10)$$

Uma vez calculadas as médias da tensão e da deformação de todo o volume do compósito $|\Psi|$, o tensor de rigidez do mesmo E^D pode ser calculado diretamente pela eq. (4.11):

$$\langle \sigma \rangle = E^D \langle \varepsilon \rangle \quad (4.11)$$

Realizando os seis ensaios fundamentais podem então ser calculadas as 21 componentes independentes do tensor de rigidez do material:

$$\begin{bmatrix} \langle \sigma_{11} \rangle_\Psi \\ \langle \sigma_{22} \rangle_\Psi \\ \langle \sigma_{33} \rangle_\Psi \\ \langle \tau_{12} \rangle_\Psi \\ \langle \tau_{23} \rangle_\Psi \\ \langle \tau_{13} \rangle_\Psi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{1111}^D & E_{1122}^D & E_{1133}^D & E_{1112}^D & E_{1123}^D & E_{1113}^D \\ & E_{2222}^D & E_{2233}^D & E_{2212}^D & E_{2223}^D & E_{2213}^D \\ & & E_{3333}^D & E_{3312}^D & E_{3323}^D & E_{3313}^D \\ & & & E_{1212}^D & E_{1223}^D & E_{1213}^D \\ & & & & E_{2323}^D & E_{2313}^D \\ & & & & & E_{1313}^D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \varepsilon_{11} \rangle_\Psi \\ \langle \varepsilon_{22} \rangle_\Psi \\ \langle \varepsilon_{33} \rangle_\Psi \\ \langle \gamma_{12} \rangle_\Psi \\ \langle \gamma_{23} \rangle_\Psi \\ \langle \gamma_{13} \rangle_\Psi \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

simétrico

Depois de estimadas todas as componentes do tensor E_{ijkl}^D , estas podem ser comparadas diretamente com as componentes do tensor homogeneizado E_{ijkl}^H .

Tal como referido na secção que descreve o modelo de material utilizado, a fase de material vazio (ou sem material) é também modelada, e para os ensaios nas condições de Dirichlet foi utilizado um rácio de rigidez $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$, que é suficientemente grande para que a rigidez oferecida pelo material vazio possa ser desprezada.

Numericamente, a modelação deste ensaio foi a menos complexa dado que o ANSYS permite impor deslocamentos nos nós possibilitando a aplicação das condições fronteira referidas atrás diretamente.

4.1.2 Condições de Neumann

As condições fronteira de Neumann foram implementadas de acordo com Zohdi e Wriggers, (2004), tal que:

$$\sigma(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}|_{\partial\psi} = \Theta^i \cdot \mathbf{n}|_{\partial\psi} \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.13)$$

Onde de maneira semelhante ao ensaio a deformação constante $\partial\Psi$ é a fronteira do material, σ é o tensor de tensão de Cauchy, \mathbf{n} é o normal ao plano e β é uma constante, Θ^i é definido pela eq. (4.2). Da mesma forma nestas condições também são realizados seis ensaios (identicamente três longitudinais e três de corte) segundo o índice i no tensor Θ .

A figura 4.2 apresenta as condições fronteira de Neumann, mais uma vez num domínio bidimensional para simplificação esquemática, onde na figura 4.2a está representado um ensaio na direção longitudinal y e na figura 4.2b um ensaio ao corte no plano xy .

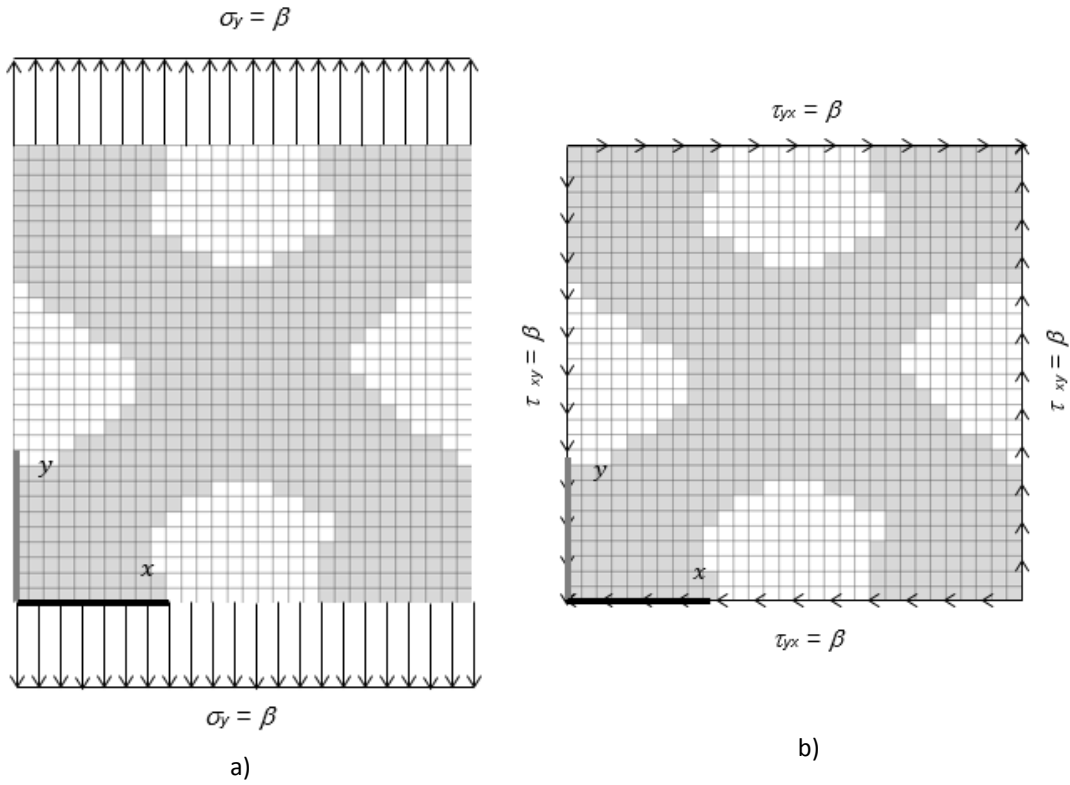


Figura 4.2 - Testes numéricos nas condições de Neumann (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;

A par das condições da utilização das condições de Dirichlet, a tensão e deformação média, respetivamente $\langle\sigma\rangle$ e $\langle\varepsilon\rangle$, são calculadas através da eq. (4.10) ao longo de todo o volume, no entanto, aqui a lei constitutiva do material vem na forma da *compliance*:

$$\langle\varepsilon\rangle = \mathbf{C}^N\langle\sigma\rangle \quad (4.14)$$

Dado que pela eq. (3.43) verifica-se a existência de constantes que se multiplicam pelos coeficientes do tensor da *compliance*, o tensor estimado com a utilização das condições de Neumann não pode ser comparado diretamente com os coeficientes do tensor homogeneizado. Esta comparação pode ser realizada corrigindo os coeficientes estimados (dividindo pelas

mesmas constantes), ou multiplicando essas constantes pelos coeficientes homogeneizados. Contudo, neste trabalho a comparação dos coeficientes foi realizada recorrendo ao facto do tensor da compliance ser o inverso do tensor de rigidez ($\mathbf{E}^N = (\mathbf{C}^N)^{-1}$). Desta forma o tensor da *compliance* estimado pelas condições de Neumann é invertido possibilitando assim a comparação direta entre coeficientes estimados e homogeneizados, E_{ijkl}^N e E_{ijkl}^H .

Ao contrário do que acontece com as condições de Dirichlet, as condições de Neumann foram utilizadas com um baixo rácio de rigidez entre a fase sólida e a fase de vazio, $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10$, o que não representa um material poroso, mas sim um material compósito de diferentes constituintes (por exemplo, fibra de vidro e resina epoxy). Tal foi necessário pois estas condições ao aplicarem a tensão diretamente em elementos de material vazio fazem com que o rácio $\mathbf{E}^N = \langle \sigma \rangle / \langle \varepsilon \rangle$ seja muito pequeno devido ao grande denominador, pois esses elementos sofrem uma grande deformação dada a sua baixa rigidez, subestimando demasiado as propriedades do material poroso. Por essas razões, as condições de Neumann foram utilizadas para um modelo de material diferente dos objetivos desta dissertação (materiais porosos).

Numericamente estas condições foram implementadas de duas maneiras distintas para diferentes tipos de ensaios. Para ensaios longitudinais a tensão constante foi aplicada diretamente utilizando uma função do ANSYS que aplica uma tensão normal a uma dada superfície. Já para ensaios em planos de corte foi necessário recorrer à aplicação de forças nos nós dado que o *software* não permite a aplicação de tensões em direções paralelas às faces. Para isso, e de modo a garantir uma tensão constante nas faces, foi realizada uma correção da intensidade das forças em função do número de elementos que pertencem ao nó:

$$F_n = \frac{N_n}{4} \quad (4.15)$$

A intensidade da força aplicada é estimada seguindo a eq. (4.15), onde F_n representa a força a aplicar em um dado nó n , e N_n é o número de elementos que pertencem ao nó n . Desta forma, para uma dada face, as forças aplicadas nos nós interiores têm valor unitário, enquanto nas arestas e nos vértices têm respetivamente valor 0.5 e 0.25.

4.2 Condições fronteira alternativas

4.2.1 Tensão

Uma vez que as condições de Neumann não se adequam ao estudo de materiais porosos foram realizadas alterações de forma a evitar as grandes deformações obtidas nos elementos da fase de vazio quando aplicada uma tensão diretamente nos mesmos.

A par das condições de Neumann, aqui seguiu-se as condições descritas pela eq. (4.13), no entanto, em vez de ser aplicada uma tensão constante em toda a fronteira do material foi

aplicada apenas uma tensão constante nos elementos de fase sólida dessa mesma fronteira. Com esta alteração foi possível reduzir as grandes deformações causadas nos elementos de fase de vazio, permitindo assim um aumento do rácio de rigidez da fase sólida e de vazio para 10^{12} , o mesmo rácio utilizado nos ensaios nas condições de Dirichlet que possibilita a análise de materiais porosos.

Tal como apresentado nas condições anteriores, a figura 4.3 representa esquematicamente num domínio bidimensional estas condições alternativas com a aplicação da tensão apenas nos elementos da fase sólida. Na figura 4.3a está representado um dos ensaios longitudinais e na figura 4.3b um ensaio de corte.

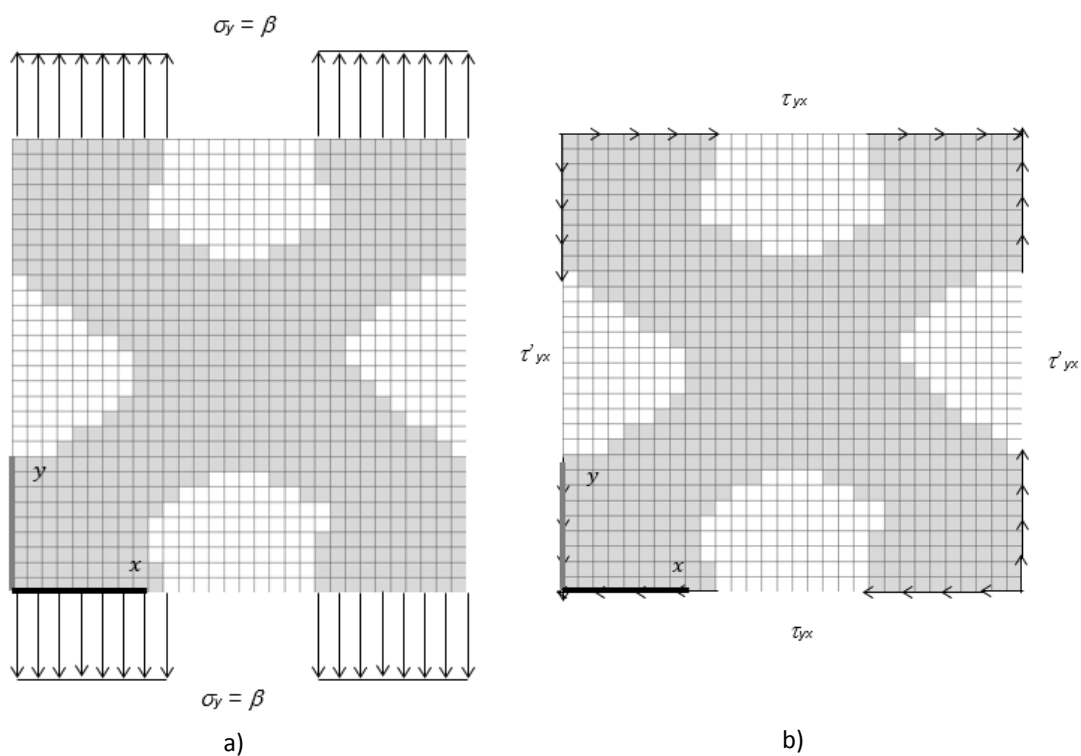


Figura 4.3 - Testes numéricos com tensão constante na fase sólida (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;

Utilizando estas condições, apesar de possibilitarem a utilização de um rácio de rigidez elevado (adequado para a utilização em materiais porosos), estas restringiram os ensaios a materiais com o mínimo de 3 planos de simetria (materiais ortotrópicos), pois apenas assim é possível aplicar uma tensão constante nas faces, com o mesmo módulo em faces opostas, satisfazendo o equilíbrio estático da estrutura.

Para a realização dos ensaios de corte foi necessário aplicar forças nos nós corrigindo a sua intensidade, mesmo nos nós interiores das faces que partilham elementos da fase sólida e da fase de vazio simultaneamente. Aplicou-se uma correção no valor da força nesses nós de forma a garantir uma tensão constante nos elementos sólidos.

$$F_n = \frac{N_{Sn}}{4} \quad (4.16)$$

A eq. (4.16), utilizada para estimar a intensidade das forças nestas condições, tem apenas uma pequena variação em relação à eq. (4.15) (utilizada nos ensaios de corte nas condições de Neumann), aqui N_{Sn} representa o número de elementos de fase sólida que pertencem ao nó n .

4.2.2 Mistas

De um ponto vista mais prático, foram utilizadas condições fronteira alternativas às anteriores. Aqui foi aplicada uma pressão uniforme em uma placa rígida que “transfere” a pressão para superfície do material (sólido e vazio) evitando assim as excessivas deformações nos elementos com menos rigidez (vazio).

Para a realização dos três ensaios nas direções longitudinais, essa placa foi modelada utilizando elementos do tipo *Shell* (casca) com a utilização de nós acoplados nas direções normais. A superfície oposta à superfície em que é aplicado o carregamento tem o deslocamento constrangido na direção da carga (ver figura 4.4a). Estas condições são equivalentes aos ensaios uniaxiais realizados em uma MTS (*Mechanical Testing System*), desprezando os efeitos de atrito, fazendo uma aproximação do modelo numérico a um método prático e bastante usual na caracterização das propriedades mecânicas de materiais.

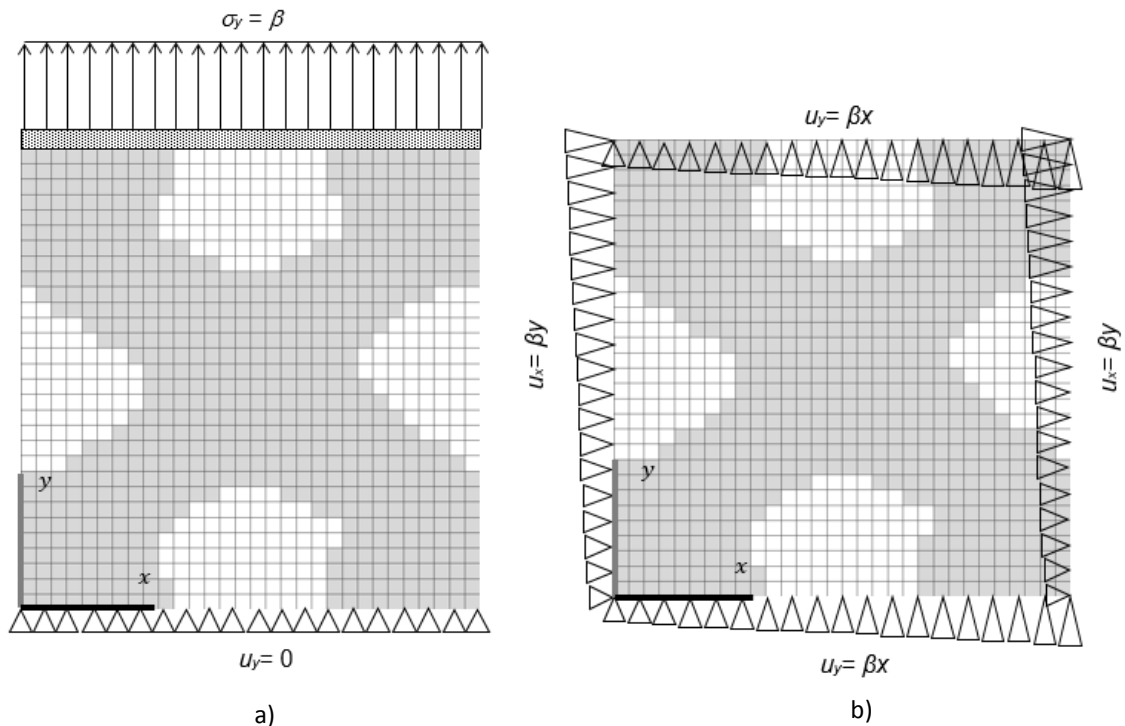


Figura 4.4 - Testes numéricos com condições mistas (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). a) Teste longitudinal; b) Teste ao corte;

A utilização de placas rígidas para a realização dos ensaios de corte não funcionariam tão bem, pois seria necessário fazer o acoplamento de várias placas em várias faces tornando-se de certa forma embaraçoso e impossível na prática. Por essa mesma razão foram aplicadas condições fronteira baseadas nos ensaios a deformação constante, sendo estas menos restritivas do que as condições de Dirichlet uma vez que os deslocamentos aqui impostos são apenas função da coordenada espacial, ver figura 4.4b (compare-se com figura 4.1b).

De forma a garantir o equilíbrio estático na realização dos ensaios numéricos, estes foram restringidos a materiais ortotrópicos. Do ponto de vista da modelação numérica, a aplicação de uma tensão em uma placa rígida utilizando o acoplamento de nós entre essa placa e o material, é equivalente a impor um deslocamento nos nós nas direções dos ensaios (apenas longitudinais), ver figura 4.5.

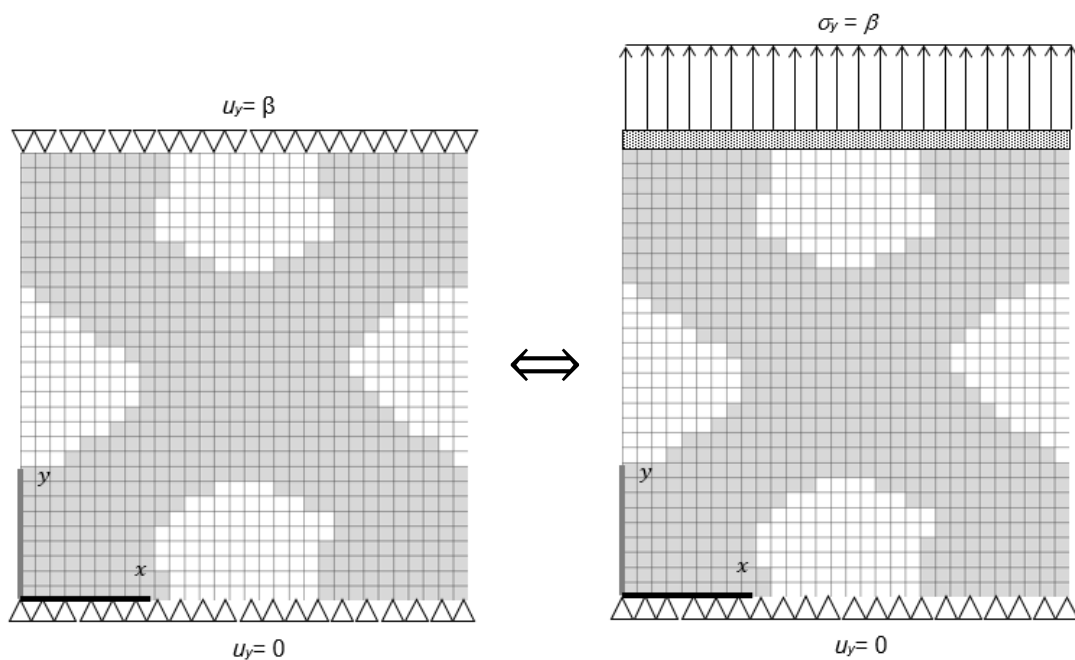


Figura 4.5 - Condições de ensaio equivalentes (aplicando um deslocamento nos elementos e aplicando uma tensão em uma placa rígida).

Essa equivalência foi verificada com a realização de testes de forma exaustiva para garantir que não haveria exceções, existindo apenas desvios inferiores a 1% quando aumentado o valor de rigidez da placa para $200 \times 10^{12} Pa$, no entanto, e para o valor de rigidez selecionado à partida, $200 \times 10^9 Pa$, a rigidez de um aço comum, o valor do desvio é nulo. Por essa razão e uma vez que a utilização de elementos *Shell* faziam com que a realização do ensaio tivesse um custo computacional acrescido, os ensaios longitudinais foram também realizados com a aplicação de deslocamentos de forma equivalente à utilização da placa rígida.

4.3 Médias volúmicas locais

Para que fossem verificadas as hipóteses admitidas pela teoria da homogeneização, realizou-se uma adaptação na forma como são estimadas as médias volúmicas (eq. 4.10). Anteriormente, estas eram calculadas em todo o domínio do material Ψ , enquanto que com esta adaptação são calculadas apenas localmente, i.e., no domínio da célula central Y , ver figura 4.6.

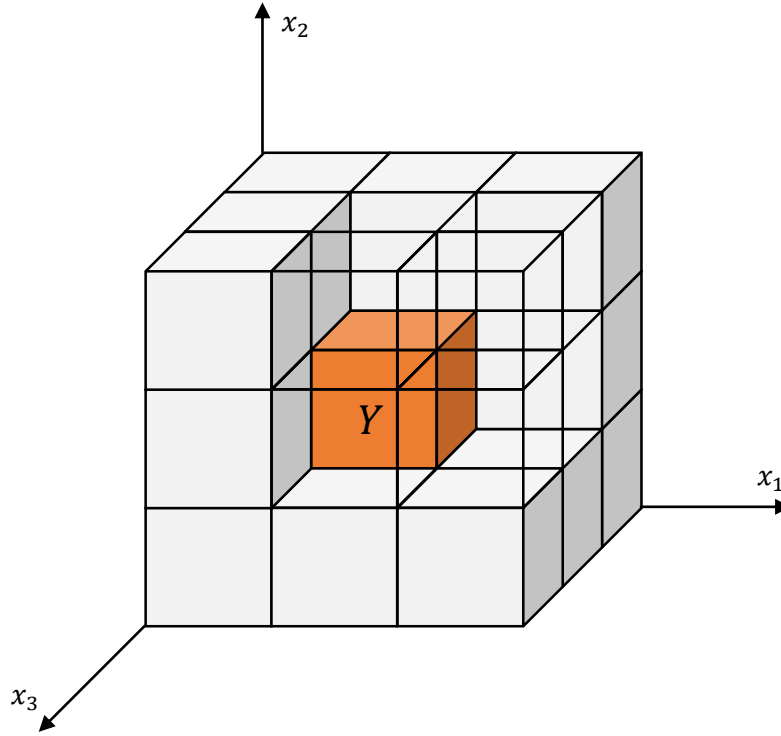


Figura 4.6 - Representação esquemática do domínio Y da célula central em um padrão periódico 3x3x3.

As médias volúmicas da tensão e da deformação são agora estimadas através da eq.(4.17):

$$\langle \bullet \rangle_Y = \frac{\int_Y \bullet dY}{|Y|} \quad (4.17)$$

Desta forma, para um número de células par, a média local não é efetuada na topologia da célula unitária, mas sim numa topologia descentrada da mesma, i.e., numa célula com as mesmas quantidades de material e de vazio mas com uma diferente topologia, ver figura 4.7.

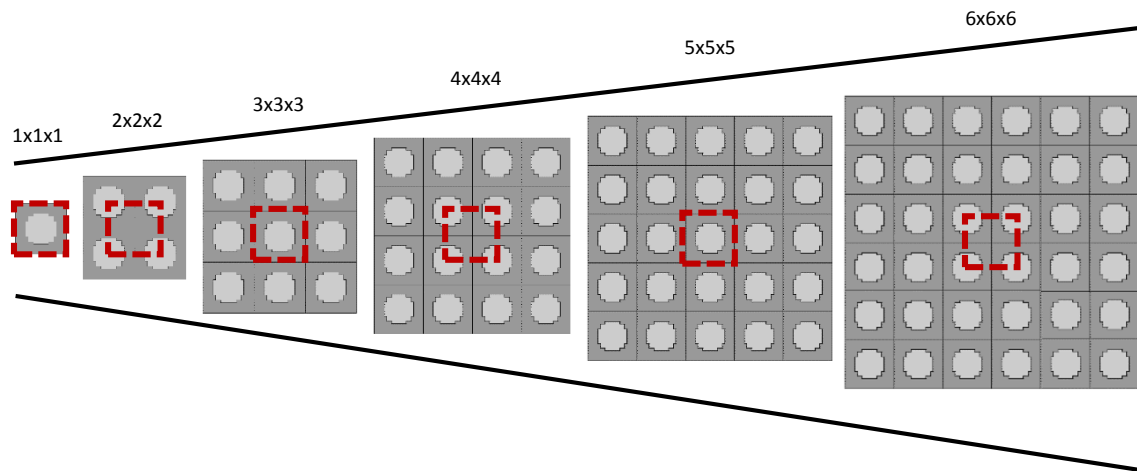


Figura 4.7 - Efeitos de escala na topologia da célula central (domínio bidimensional para uma maior simplicidade). Para $n = 2$, $n = 4$ e $n = 6$, a média local é realizada na célula descentrada.

Do ponto de vista prático no projeto de materiais, esta metodologia não apresenta um resultado tão importante dado que as propriedades elásticas estimadas na célula central podem não representar tão bem as propriedades apresentadas pelo material no seu total. Ainda assim, este método foi utilizado para todos os tipos de ensaio apresentados anteriormente, dada a sua importância na verificação da periodicidade do material assumida pela homogeneização.

5. Resultados

5.1 Topologias ótimas

Através da formulação do problema de otimização apresentado anteriormente, eq. (3.1), verifica-se que a topologia final ótima de uma microestrutura depende diretamente do campo de tensões definido e das restrições de projeto. Por essa razão, e para que no presente trabalho houvesse uma amostra suficientemente representativa dos diferentes casos de anisotropia de material, foi utilizado um gerador de números aleatórios para definir campos de tensões a serem utilizados nos processos de otimização. Foram realizadas, para diferentes constrangimentos quer de permeabilidade quer de volume, um número grande de otimizações de forma a serem obtidas microestruturas com diferentes topologias e consequentemente diferentes propriedades elásticas. Com a análise das microestruturas obtidas, uma vez que não é possível cobrir todas as topologias, foi selecionado um bom conjunto representativo das mesmas dado o grande espectro de graus de anisotropia abrangido.

Como material de base para a microestrutura foi selecionado o polycaprolactone (PCL), frequentemente utilizado no fabrico de scaffolds em engenharia de tecidos, com um módulo de *Young* $E^0 = 290\text{MPa}$ e um coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$. Assume-se aqui material linear isotrópico.

O conjunto de microestruturas selecionado para o presente trabalho está representado nas tabelas 5.1 e 5.2. Para cada estado de tensão são apresentadas as topologias ótimas obtidas pela resolução do problema de otimização, quer para constrangimentos de volume quer para constrangimentos de permeabilidade. A representação gráfica de anisotropia e o parâmetro \mathcal{A} justificam que o conjunto de microestruturas selecionado é uma boa amostra das infinitas topologias possíveis de material, não estando presente nenhuma topologia com um parâmetro \mathcal{A} entre 1.0806 e 2 pois de todos os problemas de otimização resolvidos (com a utilização do gerador de números aleatórios), não foi obtida nenhuma microestrutura com um parâmetro \mathcal{A} nessa gama de valores.

Tabela 5.1 - Estados de tensão normais e topologias ótimas correspondentes (apenas é mostrada fase sólida) para constrangimentos de volume e de permeabilidade. Representação gráfica da anisotropia e correspondente valor de \mathcal{A} .

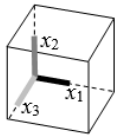
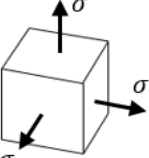
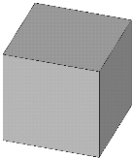
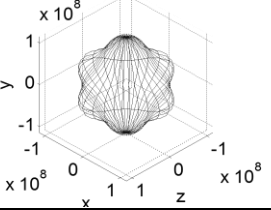
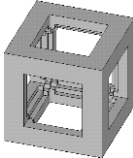
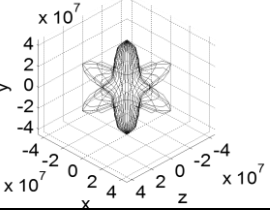
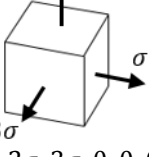
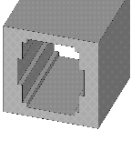
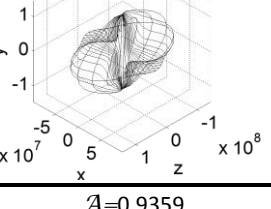
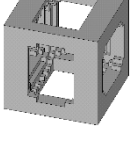
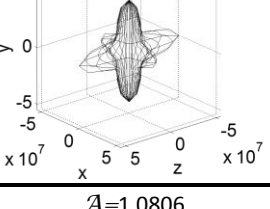
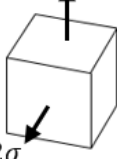
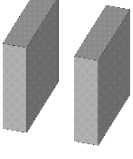
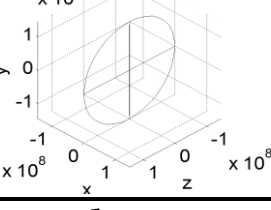
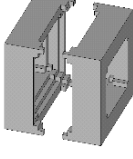
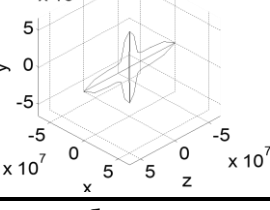
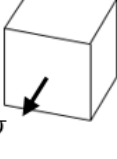
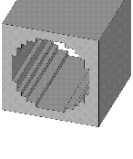
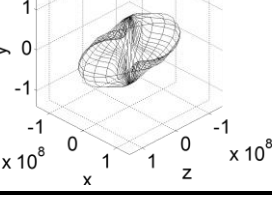
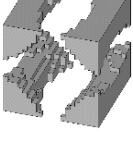
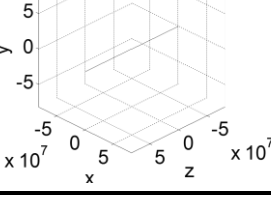
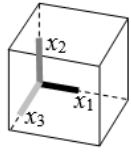
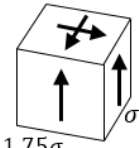
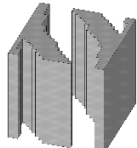
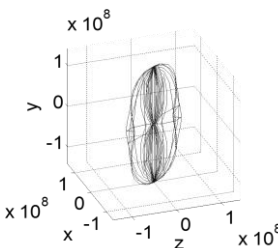
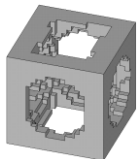
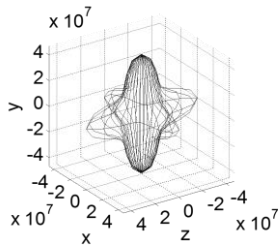
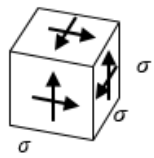
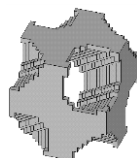
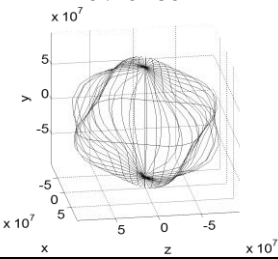
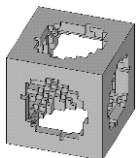
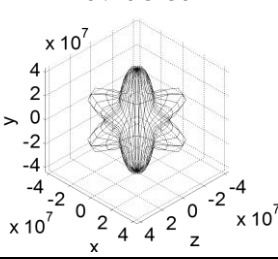
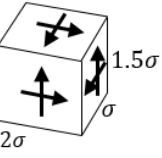
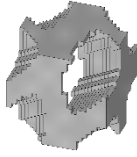
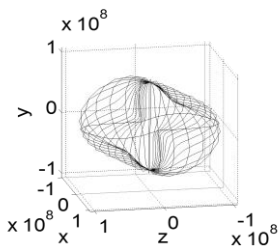
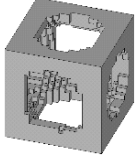
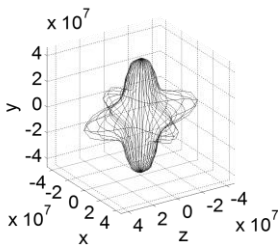
Estado de tensão  ($\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{13}$)	Constrangimento de volume $V^* = 50\%$		Constrangimento de permeabilidade $k^* = 50\%$	
	Topologia	Medida de anisotropia	Topologia	Medida de anisotropia
Hidrostático  ($\sigma; \sigma; \sigma; 0; 0; 0$)		$\mathcal{A}=0.1644$ 		$\mathcal{A}=0.4351$ 
Triaxial  ($\sigma; 2\sigma; 3\sigma; 0; 0; 0$)		$\mathcal{A}=0.3997$ 		$\mathcal{A}=0.4658$ 
Biaxial  ($0; \sigma; 2\sigma; 0; 0; 0$)		$\mathcal{A}=0.9359$ 		$\mathcal{A}=1.0806$ 
Uniaxial  ($0; 0; \sigma; 0; 0; 0$)		$\mathcal{A}=0.3649$ 		$\mathcal{A}=2.0000$ 

Tabela 5.2 - Estados de tensão de corte e topologias ótimas correspondentes (apenas é mostrada fase sólida) para constrangimentos de volume e de permeabilidade. Representação gráfica da anisotropia e correspondente valor de \mathcal{A} .

Estado de tensão  ($\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{13}$)	Constrangimento de volume $V^* = 50\%$		Constrangimento de permeabilidade $k^* = 50\%$	
	Topologia	Medida de anisotropia	Topologia	Medida de anisotropia
Corte2  (0; 0; 0; 1.75 σ ; σ ; 0)		$\mathcal{A}=0.7291$ 		$\mathcal{A}=0.3974$ 
Corte3a  (0; 0; 0; σ ; σ ; σ)		$\mathcal{A}=0.2902$ 		$\mathcal{A}=0.3796$ 
Corte3b  (0; 0; 0; σ ; 2 σ ; 1.5 σ)		$\mathcal{A}=0.4200$ 		$\mathcal{A}=0.3790$ 

Uma vez que existem topologias com estados de anisotropia semelhantes, das 14 microestruturas apresentadas anteriormente, apenas 8 farão parte do estudo dos efeitos de escala presentes na secção 5.2, pois sobrecarregaria desnecessariamente este trabalho o estudo de todas as microestruturas. Dessa forma foram selecionadas 4 topologias obtidas com a utilização de constrangimentos de permeabilidade (triaxial, biaxial, uniaxial e corte3b) e 4 topologias obtidas com a utilização de constrangimentos de volume (hidrostático, corte2, corte3a e corte3b).

Na tabela 5.3 são apresentados na forma reduzida (matricial) e pela ordem apresentada na eq. (3.25) os tensores de elasticidade homogeneizados \mathbf{E}^H das microestruturas selecionadas.

Tabela 5.3 - Tensores de elasticidade homogeneizados das 8 microestruturas selecionadas [MPa].

Hidroestático ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 128.25 & 33.15 & 33.15 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 128.25 & 33.15 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 128.25 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 28.57 & 0.00 & 0.00 \\ \text{SYM} & & & & 28.57 & 0.00 \\ & & & & & 28.57 \end{bmatrix}$	Triaxial ($k^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 37.00 & 5.25 & 5.24 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 46.80 & 7.31 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 57.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 5.35 & 0.00 & 0.00 \\ \text{SYM} & & & & 5.89 & 0.00 \\ & & & & & 4.72 \end{bmatrix}$	Biaxial ($k^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 49.32 & 7.48 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 67.65 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ \text{SYM} & & & & 5.41 & 0.00 \\ & & & & & 0.00 \end{bmatrix}$
Uniaxial ($k^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & 81.36 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ & & & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ \text{SYM} & & & & 0.00 & 0.00 \\ & & & & & 0.00 \end{bmatrix}$	Corte2 ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 24.60 & 15.17 & 25.97 & 0.00 & 0.00 & 25.29 \\ & 157.42 & 35.91 & 0.00 & 0.00 & 17.57 \\ & & 93.73 & 0.00 & 0.00 & 33.27 \\ & & & 19.71 & 18.25 & 0.00 \\ \text{SYM} & & & & 39.75 & 0.00 \\ & & & & & 28.45 \end{bmatrix}$	Corte3a ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 105.69 & 40.43 & 40.43 & 11.77 & 2.74 & 11.77 \\ & 105.69 & 40.43 & 11.77 & 11.77 & 2.74 \\ & & 105.69 & 2.74 & 11.77 & 11.77 \\ & & & 35.73 & 7.84 & 7.84 \\ \text{SYM} & & & & 35.73 & 7.84 \\ & & & & & 35.73 \end{bmatrix}$
Corte3b ($V^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 68.95 & 38.64 & 35.11 & 20.78 & -4.02 & 14.60 \\ & 99.81 & 35.44 & 18.94 & 3.02 & 4.73 \\ & & 122.09 & 10.11 & 1.92 & 11.68 \\ & & & 36.57 & 8.00 & 1.47 \\ \text{SYM} & & & & 31.71 & 13.90 \\ & & & & & 33.54 \end{bmatrix}$	Corte3b ($k^* = 50\%$) $\begin{bmatrix} 43.24 & 5.22 & 5.84 & -1.22 & -0.14 & -0.49 \\ & 46.55 & 6.57 & -1.08 & -0.48 & -0.13 \\ & & 48.09 & -0.14 & -0.34 & -0.19 \\ & & & 6.09 & 0.21 & 0.27 \\ \text{SYM} & & & & 7.22 & 0.27 \\ & & & & & 6.64 \end{bmatrix}$	

Para o caso hidrostático, verifica-se pelo tensor de elasticidade apresentado que estamos na presença de um material de simetria cúbica, ou seja, o tensor é composto apenas por 3 coeficientes elásticos independentes. Os tensores das microestruturas triaxial, biaxial e uniaxial são de simetria ortotrópica, já a microestrutura corte2 apresenta simetria monoclinica. Os restantes tensores apresentam coeficientes negativos e são totalmente preenchidos, i.e., sem componentes nulas (simetria triclinica), ver secção 3.5.3.

Através da realização dos ensaios numéricos descritos no capítulo 4 são estimados os tensores de rigidez \mathbf{E}^* que são comparados (componente a componente) com os tensores homogeneizados \mathbf{E}^H apresentados na tabela 5.3, sendo que estes últimos são os tensores obtidos com a utilização de um rácio $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$, no entanto, nem para todos os ensaios e microestruturas este rácio foi utilizado. Para microestruturas sem conectividade da fase sólida em pelo menos uma direção (caso uniaxial e biaxial) de forma a impedir movimentos de corpo rígido, foi necessário diminuir esse rácio para 1000 com a utilização das condições fronteira alternativas (ver secção 4.2). Já para todos os ensaios realizados com a utilização das condições de Neumann foi necessário diminuir o rácio apenas para 10, dadas as razões apresentadas anteriormente (ver secção 4.1.2). Dessa forma, para uma correta comparação entre os tensores elásticos homogeneizados \mathbf{E}^H e os estimados \mathbf{E}^* , os tensores apresentados na tabela 5.3 são devidamente atualizados dependendo do rácio de rigidez utilizado, 10 ou 1000, na análise comparativa em causa.

5.2 Análise de efeitos de escala

5.2.1 Condições fronteira periódicas

Dado que no domínio da célula central (conceito apresentado anteriormente) existe uma maior aproximação às condições de periodicidade assumidas pela teoria da homogeneização, foram determinados numericamente os deslocamentos dos nós que fazem parte da fronteira dessa mesma célula, de forma a ser representada a deformação da mesma. Assim é possível verificar graficamente de que modo a periodicidade é válida no domínio da célula central com o aumento do fator de escala.

Para este estudo foi utilizada apenas a microestrutura corte3b com constrangimento de permeabilidade ativo pois esta apresenta elementos da fase de vazio em todas as faces da mesma, tornando os resultados mais interessantes. Os efeitos de escala na deformação da célula central com a utilização das condições de Dirichlet são apresentados nas tabelas 5.4 e 5.5. Os resultados obtidos com a utilização das condições de Neumann devem ser consultados no anexo I e II. Na figura 5.1 está representada a microestrutura e os planos onde foram obtidos os deslocamentos dos nós no estudo da periodicidade da deformação.

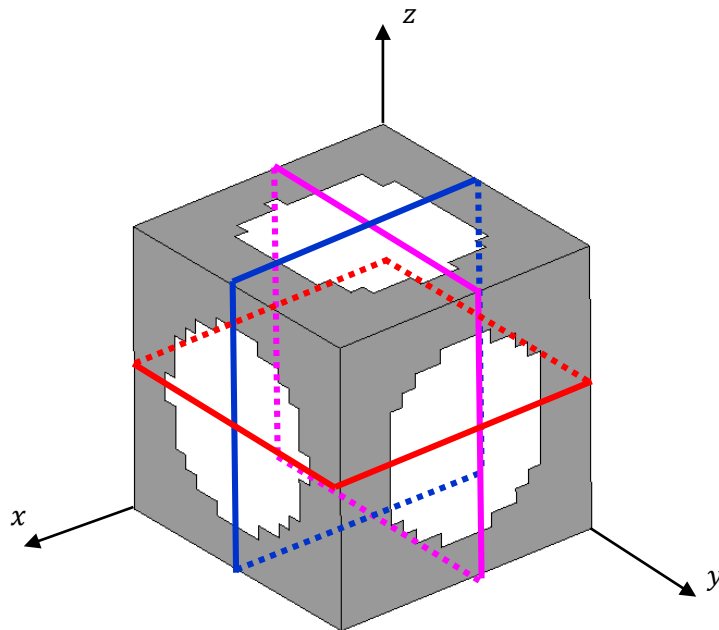


Figura 5.1 - Representação da célula unitária utilizada e dos planos apresentados nas tabelas 5.4 e 5.5 no estudo da periodicidade da deformação.

Tabela 5.4 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio longitudinal na direção x aplicando as condições de Dirichlet.

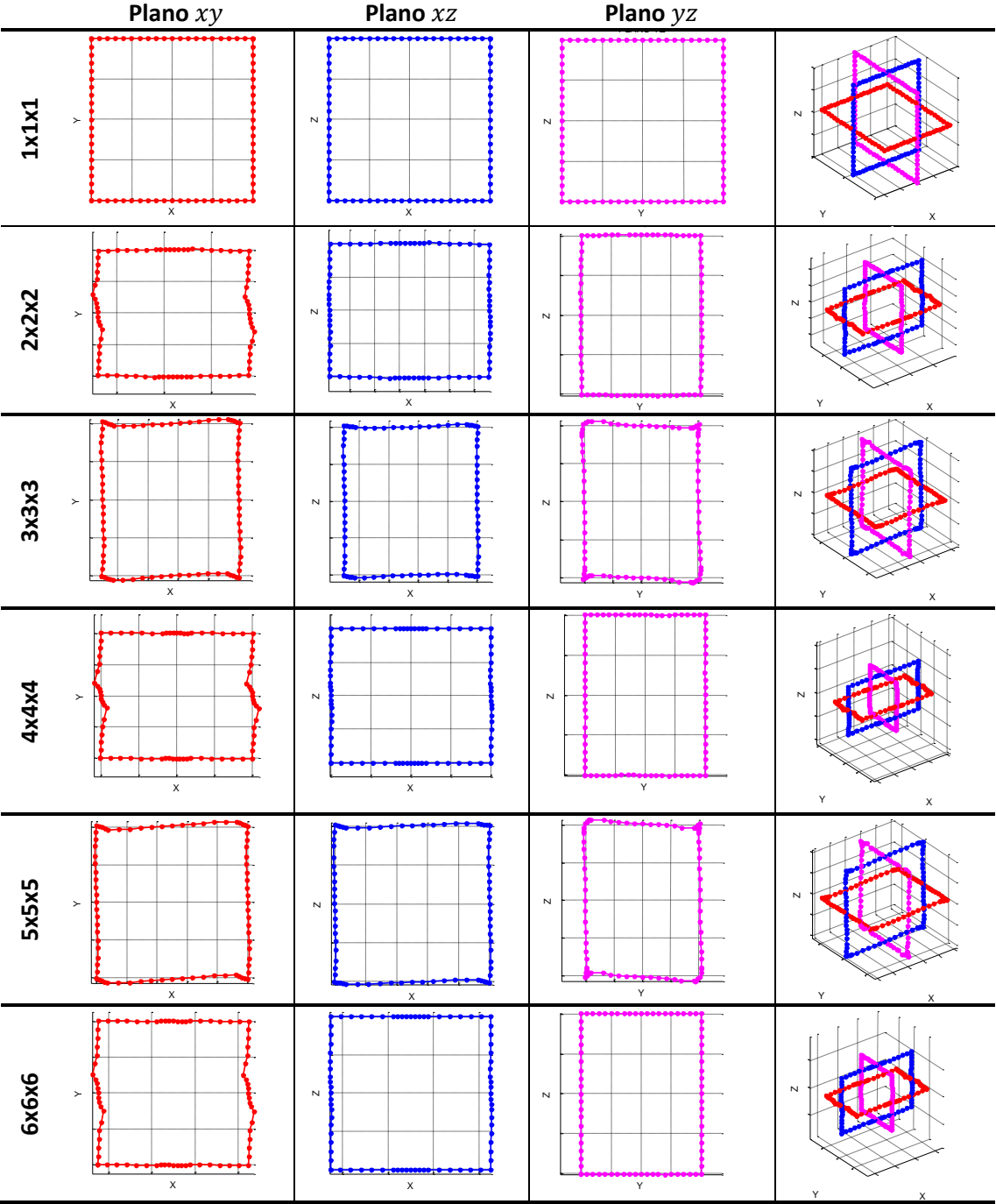
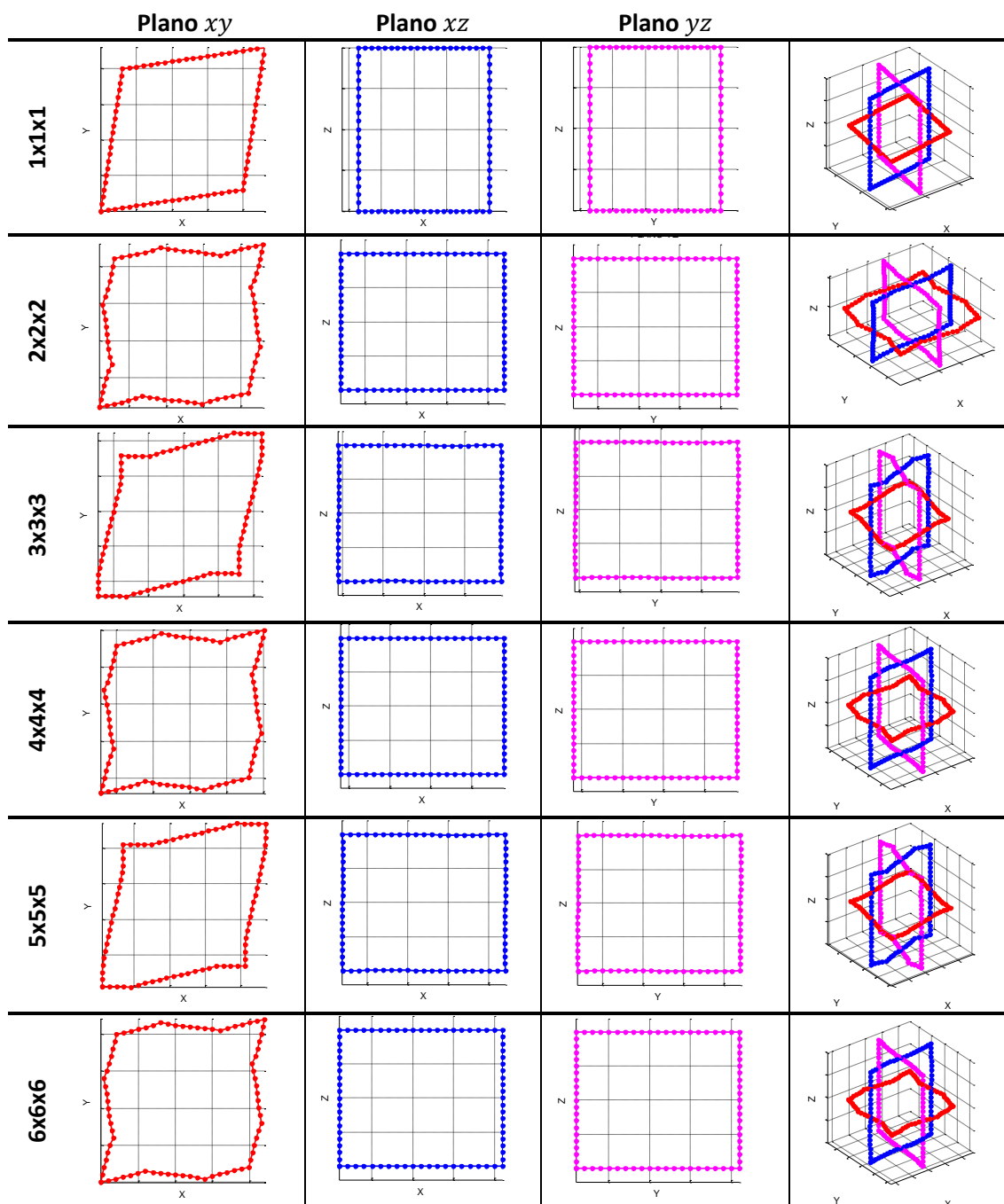


Tabela 5.5 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio de corte no plano xy aplicando as condições de Dirichlet.



As deformações são apresentadas para diferentes números de repetição da célula unitária utilizando diferentes fatores de amplificação dos resultados da deformada (deslocamentos) uma vez que estes variam entre valores de diferentes ordens de grandeza. Assim, os resultados expostos devem ser interpretados qualitativamente (padrão de deformação) e não quantitativamente (valores absolutos de deslocamento).

Os resultados mostram que a célula central assume dois padrões periódicos de deformação distintos, o primeiro quando se observa a deformação na topologia da microestrutura

e o segundo quando a topologia da célula central representa a versão descentrada da mesma. Quando existe apenas uma repetição da célula de base unitária, não se verifica periodicidade na deformação uma vez que desta forma as condições fronteira são aplicadas diretamente na célula, estando assim a deformação associada ao estado de deformação ou de tensão imposto.

Apesar da microestrutura estar em equilíbrio estático em todos os ensaios mecânicos realizados numericamente com as condições de Dirichlet, com a utilização das condições de Neumann (anexo I e II), verifica-se a existência de movimentos de corpo rígido (rotação da microestrutura). Impondo condições de deslocamentos nulos em pontos específicos do corpo poderia ser impedido o movimento do mesmo, no entanto, desta forma estar-se-ia a influenciar a forma como a microestrutura se deforma. O movimento de corpo rígido apenas acontece devido à utilização de aproximações numéricas, pois o equilíbrio estático está garantido analiticamente em todos os testes realizados e dessa forma esse movimento não tem nenhuma influência no cálculo das propriedades elásticas do material.

Com a utilização das condições de Neumann para o ensaio longitudinal apresentado, apesar de este assumir também dois padrões periódicos de deformação distintos (semelhantemente ao ensaio de Dirichlet), para o fator de escala $n = 2$ (topologia descentrada), a periodicidade não é satisfeita entre nós de faces opostas, tal deve-se ainda à influência direta das condições fronteira impostas e ao baixo fator de escala utilizado.

5.2.2 Coeficientes do tensor de elasticidade

Nesta secção é feito o estudo comparativo entre os tensores elásticos homogeneizados \mathbf{E}^H e os tensores estimados \mathbf{E}^* com base nos efeitos de escala para as microestruturas e condições apresentadas anteriormente.

Nos gráficos expostos de seguida (figuras 5.2–5.9), o eixo das ordenadas é a percentagem de desvio entre as componentes do tensor homogeneizado e do estimado, dado pela eq. (5.1), por sua vez, o eixo das abcissas identifica as componentes independentes não nulas do tensor elástico E_{ijkl} .

$$\text{Desvio [\%]} = \frac{(E^* - E^H)}{E^H} \times 100 \quad (5.1)$$

A comparação é apresentada sob a forma de gráficos de barras utilizando um gradiente de cinzentos que diferenciam os diferentes fatores de escala n utilizados (de 1 até 6). Os gráficos estão ordenados pela ordem que as microestruturas são apresentadas nas tabelas 5.1 e 5.2 e pelas condições utilizadas na realização dos ensaios numéricos (capítulo 4).

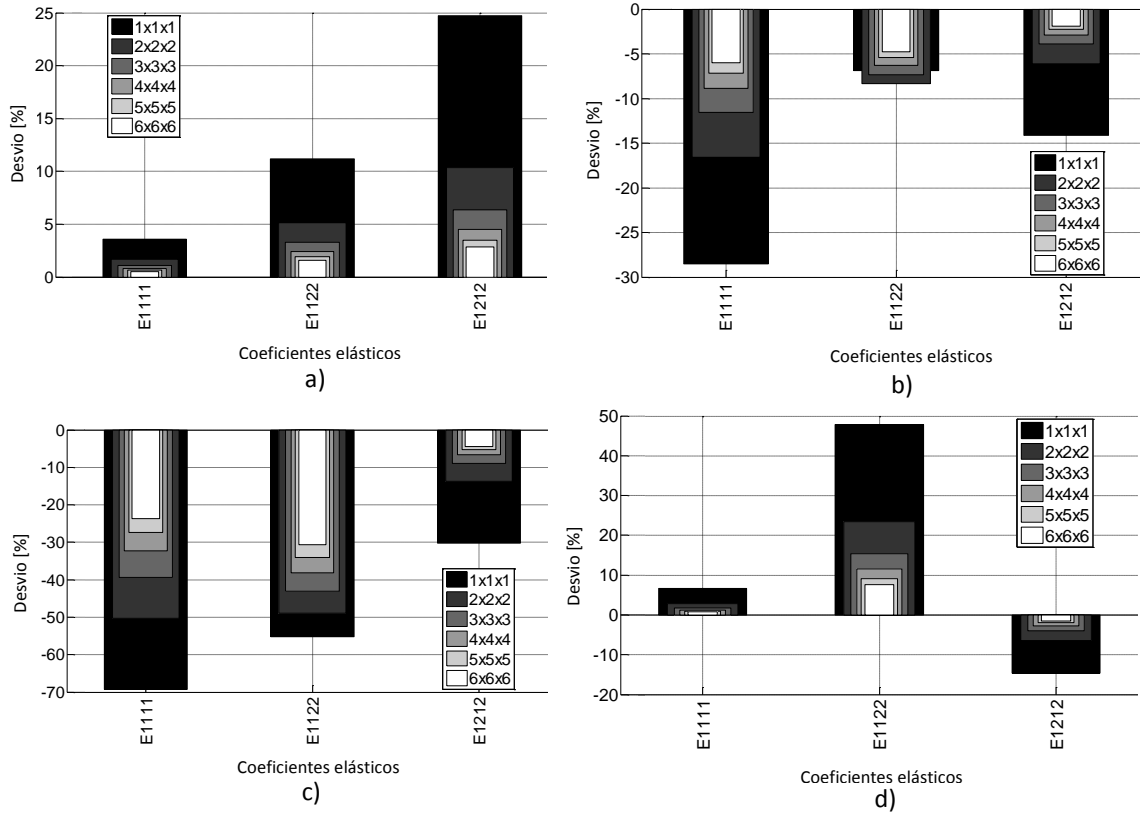


Figura 5.2 - Análise dos efeitos de escala para o caso **hidrostático** com $V^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; d) Condições mistas com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$.

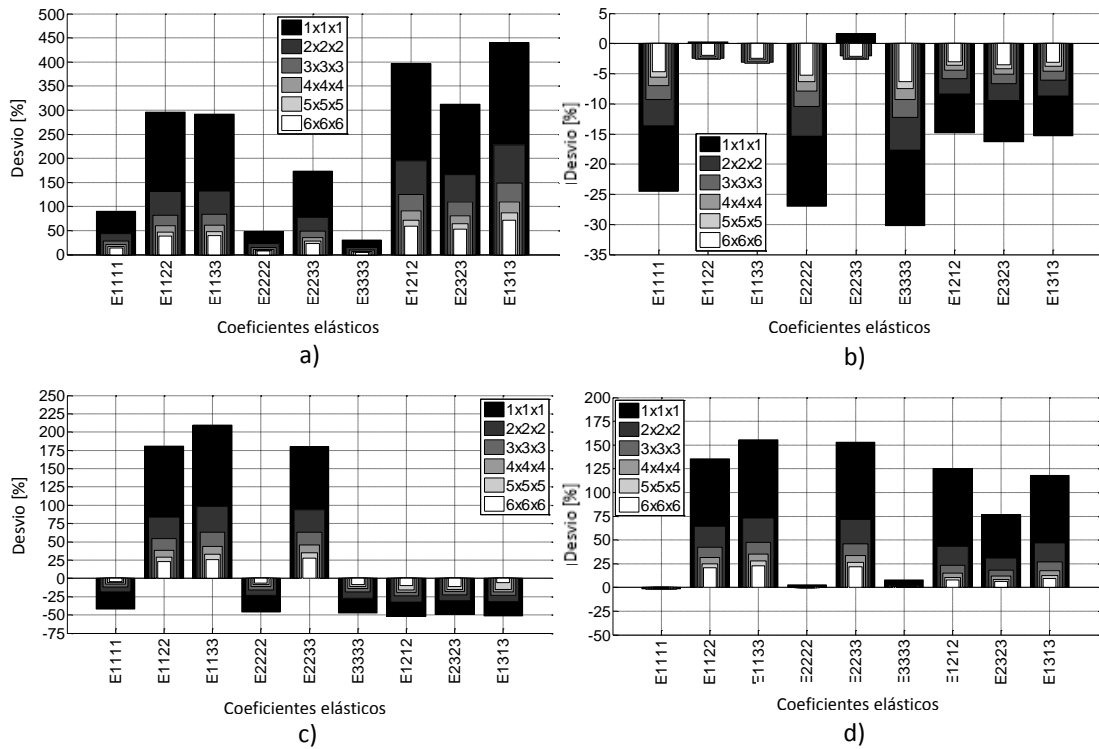


Figura 5.3 - Análise dos efeitos de escala para o caso **triaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; d) Condições mistas com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015)

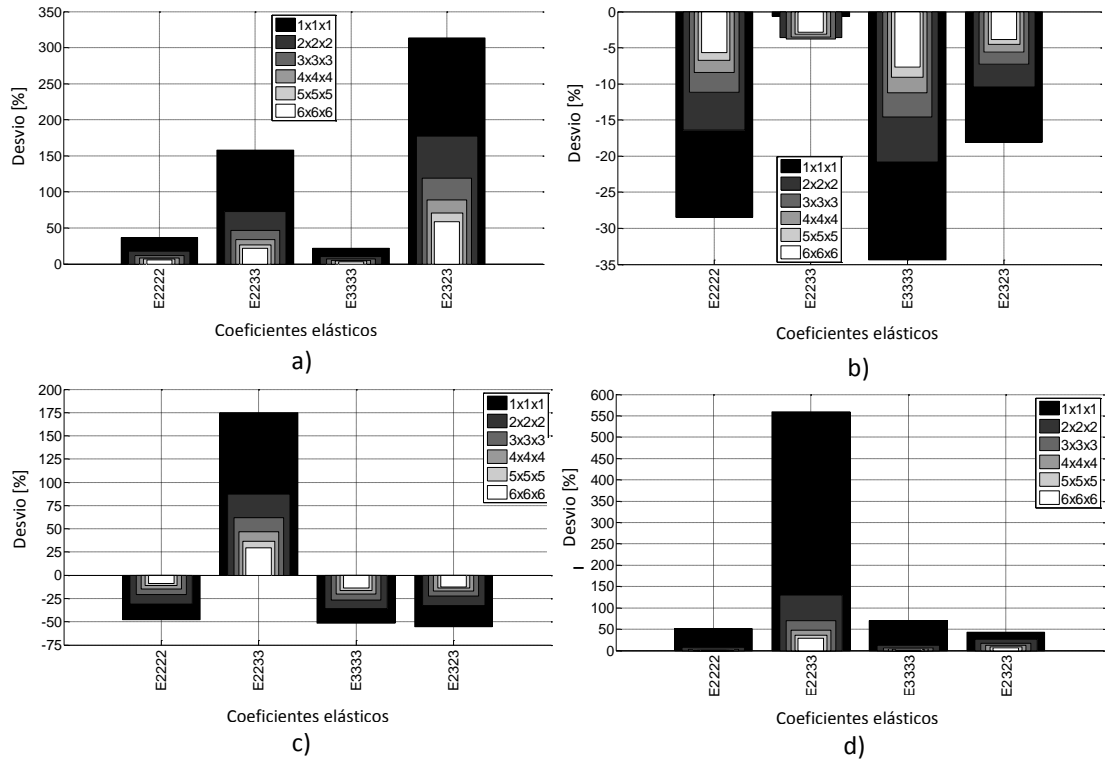


Figura 5.4 - Análise dos efeitos de escala para o caso **biaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^3$; d) Condições mistas com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^3$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015)

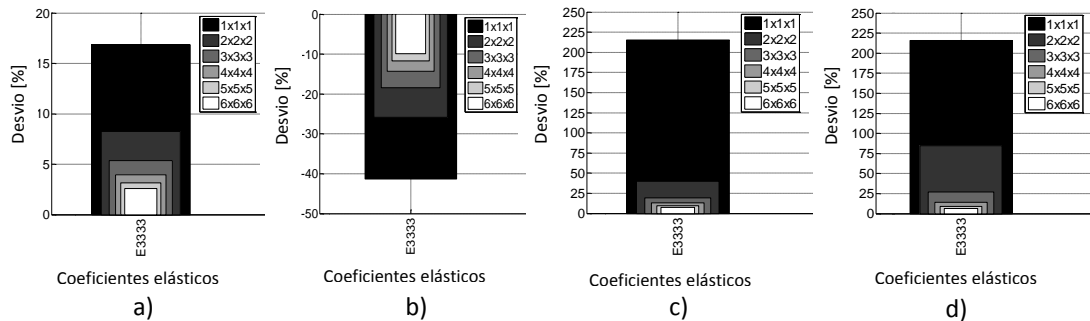


Figura 5.5 - Análise dos efeitos de escala para o caso **uniaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^3$; d) Condições mistas com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^3$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015)

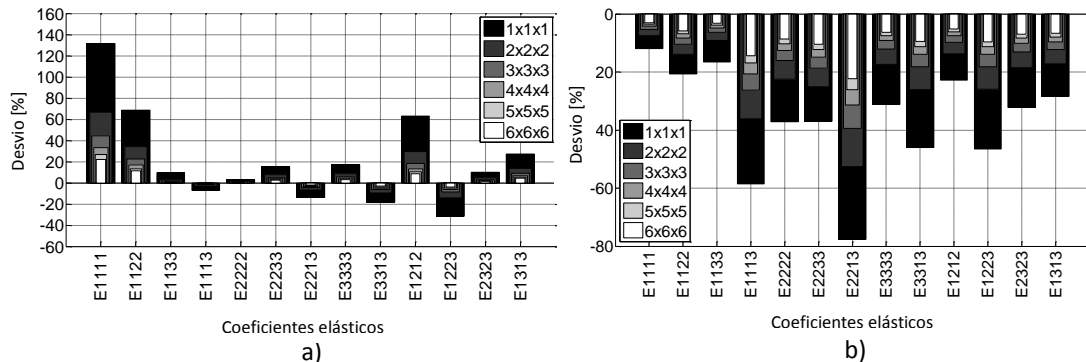
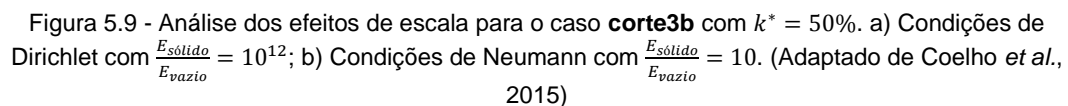
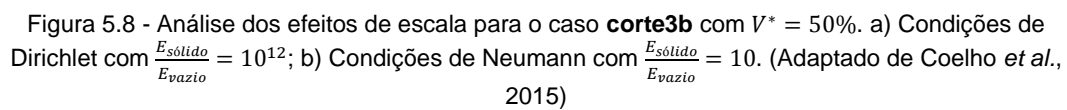
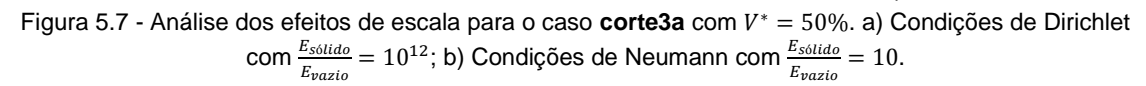


Figura 5.6 - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte2** com $V^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10$. (Adaptado de Coelho *et al.*, 2015)



O caso hidrostático apresenta uma particularidade em relação aos restantes, uma vez que a topologia da microestrutura não apresenta elementos da fase de vazio na fronteira do

domínio de material, aplicar as condições de Neumann ou as condições alternativas de tensão constante na fase sólida é exatamente igual. Por essa razão seria possível para este caso, utilizar as condições de Neumann com um rácio de rigidez adequado ao estudo de materiais porosos. Contudo, para que existisse uma possível comparação dos desvios obtidos para as mesmas condições com diferentes rácios de rigidez, manteve-se os rácios definidos anteriormente. Assim, comparando a figura 5.2b e 5.2c verifica-se uma grande melhoria nos resultados quando o rácio de rigidez utilizado é menor (nas condições de Neumann).

Os resultados apresentados mostram que os coeficientes pertencentes à diagonal dos tensores estimados através das condições de Dirichlet, E_{iiii}^D e E_{ijij}^D , convergem sempre por cima do valor homogeneizado com o aumento de n . Contrariamente, as condições de Neumann produzem estimativas dos coeficientes E_{iiii}^N e E_{ijij}^N que convergem por baixo dos coeficientes homogeneizados. Estes resultados estão de acordo com os trabalhos publicados anteriormente Hollister e Kikuchi, (1992); Pecullan, (1999). Já as restantes componentes do tensor (que não pertencem à diagonal do mesmo), não convergem da mesma forma para diferentes microestruturas, i.e., independente das condições aplicadas estas convergem por valores superiores ou inferiores aos homogeneizados.

Com a utilização das condições de Dirichlet, os desvios obtidos para o maior fator n utilizado neste estudo foram sempre inferiores a 75%, reduzidos para menos de 25% nos módulos de rigidez longitudinais, E_{iiii}^D .

Os desvios obtidos na estimativa pelas condições de Neumann para os coeficientes E_{iiii}^N e E_{ijij}^N foram bastante baixos para um fator n tão pequeno ($< 10\%$ para $n = 6$), o que prova a eficiência destas condições para o cálculo de propriedades elásticas de materiais compósitos compostos por dois materiais, uma vez que foi utilizado um baixo rácio de rigidez entre a fase sólida e a fase de vazio, $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10$. As restantes componentes, para o mesmo fator n apresentam desvios em relação ao valor homogeneizado inferiores a 60%.

Para o estudo realizado não é possível fazer uma comparação direta entre os desvios obtidos pelas condições de Dirichlet e de Neumann pois foram utilizados rácios diferentes de rigidez entre fases que têm uma influência direta nos resultados obtidos (como referido anteriormente). Contudo, utilizando as condições de tensão constante apenas na fase sólida da microestrutura, foi possível utilizar um rácio $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$, possibilitando assim uma comparação direta de resultados com as condições de Dirichlet. Utilizando as condições de tensão constante na fase sólida perdeu-se o critério de tensão constante dado pelas condições de Neumann e também apenas foi possível estimar as propriedades elásticas de materiais ortotrópicos. Com a utilização destas condições verificou-se uma melhoria significativa nos resultados em comparação com as condições de Dirichlet, dado que alguns desvios são reduzidos de 60% para apenas 8%, ainda assim há que ter em atenção que a comparação dos casos uniaxial e biaxial não é totalmente correta dado os diferentes rácios de rigidez utilizados. Apenas no caso

hidrostático não se verificou uma melhoria em relação às condições de Dirichlet (onde os desvios aumentaram mesmo), pois apesar de não ser aplicada diretamente uma tensão em elementos da fase de vazio, as tensões transmitidas para os mesmos foram suficientemente grandes para que ocorressem deformações elevadas nestes elementos. Desta forma, foram subestimadas as propriedades elásticas da microestrutura em estudo, aumentando os desvios em relação aos valores homogeneizados.

A utilização das condições de fronteira mistas resultaram numa melhoria significativa dos resultados, sendo obtidos alguns desvios na ordem dos 0%, ver figuras 5.2d, 5.3d, 5.4d e 5.5d. No geral, as condições de Dirichlet e de Neumann produzem estimativas mais conservativas enquanto as condições fronteira alternativas convergem mais rápido para os valores teóricos.

No estudo dos casos que apresentam um maior número de componentes não nulas, corte2 e corte3b verifica-se uma convergência perfeita nas figuras 5.6, 5.6 e 5.8a com a maioria dos desvios inferiores a 20% para $n = 6$. Os maiores desvios verificam-se nas figuras 5.7b e 5.9 onde chegam a cerca de 60% para o maior fator de escala em estudo. Da tabela 5.3 verifica-se a maior complexidade do tensor elástico do caso de corte3b com constrangimento de permeabilidade ativo, apesar disso, os tensores estimados \mathbf{E}^D e \mathbf{E}^N estão de acordo com o tensor homogeneizado \mathbf{E}^H em todos os sinais dos coeficientes e os maiores desvios ocorrem para os coeficientes que diferem do maior módulo de rigidez por uma ou duas ordens de grandeza. Os desvios obtidos para esta microestrutura provam a importância do estudo dos efeitos de escala na convergência das propriedades elásticas em relação aos valores teóricos para materiais anisotrópicos.

Ainda que não esteja presente neste trabalho resultados para as condições de Dirichlet com um rácio $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10$, esta situação foi testada verificando-se uma melhoria nos resultados, semelhantes aos obtidos pelas condições de Neumann para o mesmo rácio, revelando-se estas condições bastante eficientes também na estimativa de propriedades elásticas de materiais compósitos compostos por dois constituintes.

Os desvios das componentes dos tensores elásticos estimados através da média local (célula central, ver secção 4.3) são apresentados nas figuras 5.10, 5.11 e 5.12, seguindo os mesmos critérios utilizados na exposição dos resultados anteriores (médias globais). Uma vez que do ponto de vista prático estes não são os resultados com mais interesse e para precaver aqui uma montra de resultados semelhantes foram selecionadas apenas 3 microestruturas que representam bem as restantes, ver as tabelas 5.1 e 5.2.

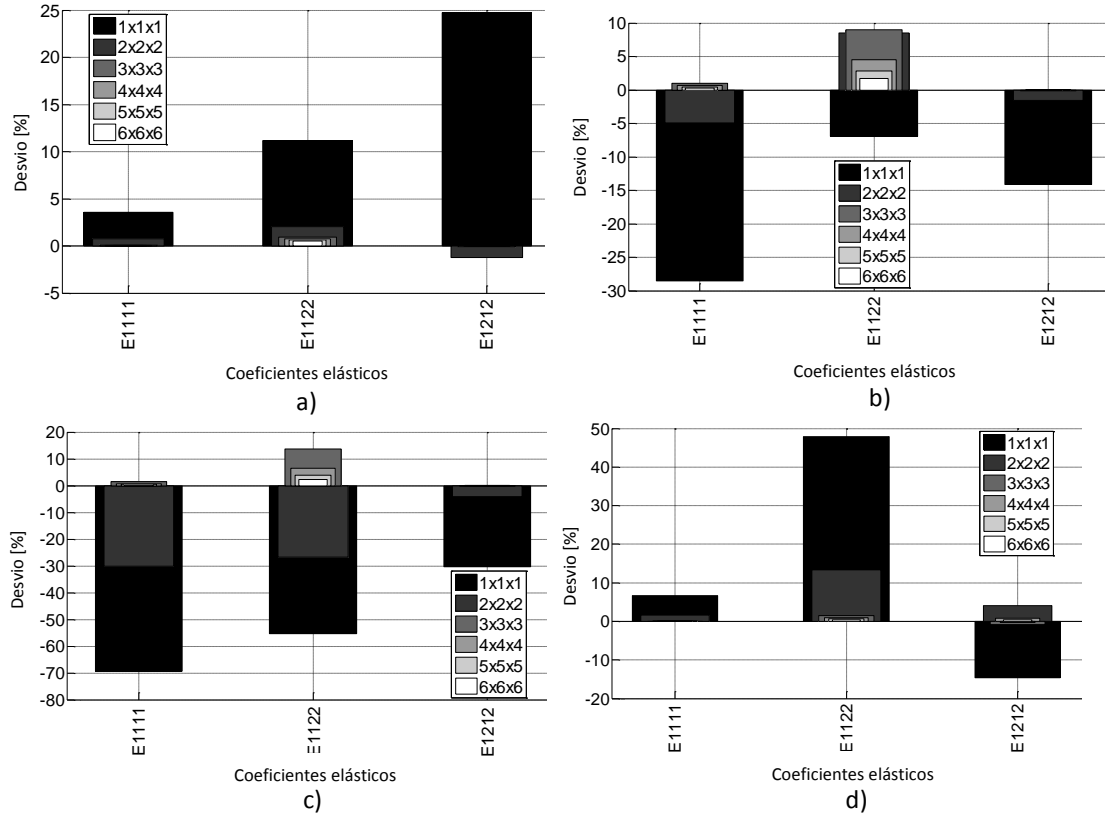


Figura 5.10 - Análise dos efeitos de escala para o caso **hidrostático** com $V^* = 50\%$ – média local. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$; d) Condições mistas com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$.

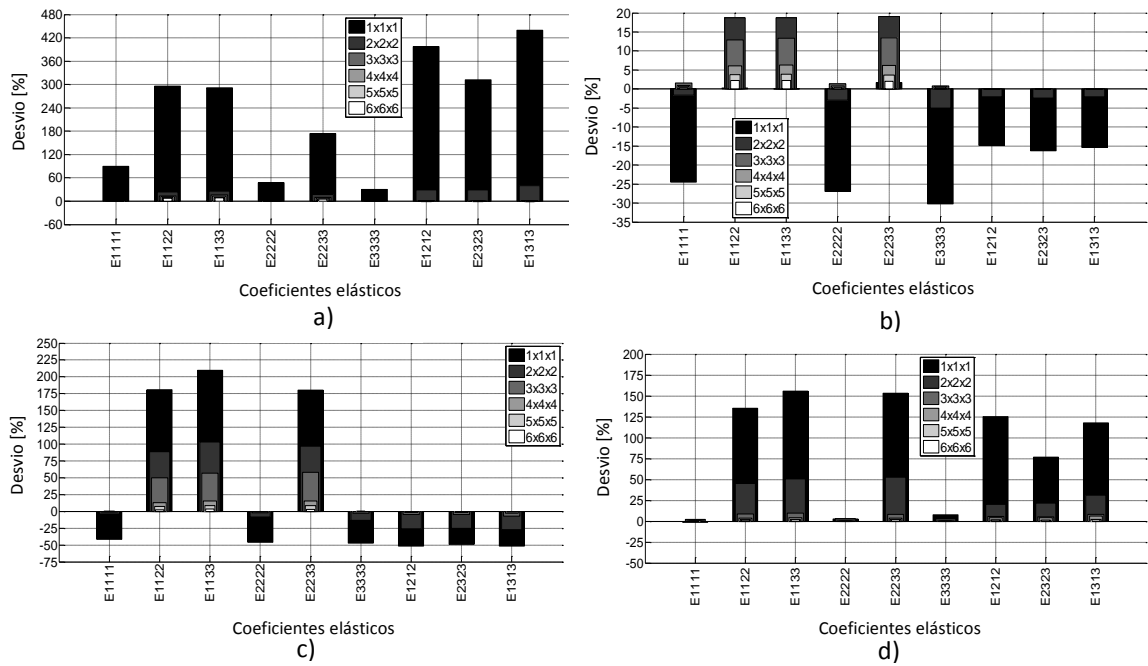


Figura 5.11 - Análise dos efeitos de escala para o caso **triaxial** com $k^* = 50\%$ – média local. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10$; c) Tensão constante na fase sólida com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$; d) Condições mistas com $\frac{E_{sólido}}{E_{vazio}} = 10^{12}$.

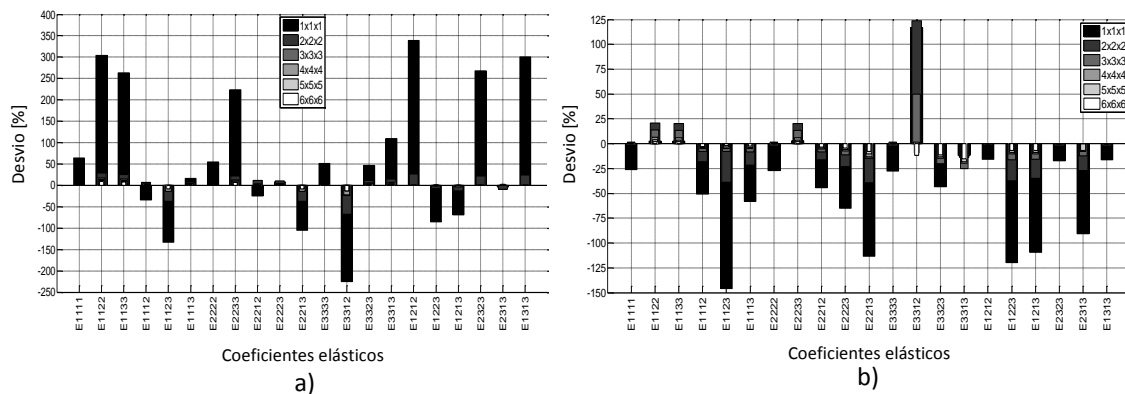


Figura 5.12 - Análise dos efeitos de escala para o caso **corte3b** com $k^* = 50\%$ - média local. a) Condições de Dirichlet com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10^{12}$; b) Condições de Neumann com $\frac{E_{\text{sólido}}}{E_{\text{vazio}}} = 10$.

Com a estimativa dos tensores elásticos através da realização de médias locais, verificou-se uma melhoria considerável face aos resultados obtidos pelas médias globais. Os resultados mostram que para um fator $n = 6$ os valores dos coeficientes elásticos estimados \mathbf{E}^* praticamente se sobrepõem aos valores homogeneizados \mathbf{E}^H , apresentando na sua grande maioria desvios inferiores a 5% verificando-se assim que as hipóteses tomadas pela teoria da homogeneização são válidas localmente.

Contudo, desta forma são perdidos os critérios de convergência quer pelas condições de Dirichlet onde se verificava (com o uso de médias globais) uma convergência sempre superior ao valor homogeneizado dos coeficientes elásticos E_{iiii}^* e E_{ijij}^* , quer pelas condições de Neumann onde os mesmos convergiam sempre por baixo do valor homogeneizado.

Os tensores de rigidez e da *compliance* estimados com a utilização das condições de Dirichlet e de Neuman respetivamente, apresentaram total simetria quando as médias da tensão e da deformação foram realizadas globalmente (em todos os elementos). Contudo, com a utilização das condições fronteira alternativas perdeu-se a simetria perfeita do tensor da *compliance* estimado, e por essa razão foi realizada a média simples dos coeficientes (dois a dois em torno da diagonal) de forma a forçar a simetria do tensor para depois ser invertido para obtenção do tensor de rigidez do material. Verificou-se que se fosse invertido o tensor assimétrico e apenas depois fossem calculadas as médias dos coeficientes, o tensor final obtido era exatamente igual ao obtido pelo processo inverso.

Estimando os tensores elásticos apenas a partir das médias locais (célula central), a simetria foi perdida independentemente das condições utilizadas, exceto para $n = 1$ com a utilização das condições de Dirichlet e de Neumann, pois desta forma a média local é igual à média global e como referido anteriormente para esta situação foi obtida simetria perfeita dos

tensores. Assim, para os tensores estimados localmente foi utilizado o processo referido anteriormente para impor uma simetria dos tensores elásticos.

Os gráficos de dispersão presentes nas figuras 5.13 e 5.14 são gerados através da representação gráfica dos valores das componentes simétricas do tensor (duas a duas), i.e., em caso de haver simetria perfeita entre duas componentes (triangular superior e triangular inferior) estimadas o ponto que as representa está sobre a reta $y = x$. Uma vez que a assimetria dos tensores acontece de forma semelhante para todas as microestruturas em estudo e para que não houvesse uma repetição de todos os gráficos, apenas são apresentados para o caso triaxial com constrangimento de permeabilidade, onde são apresentados para todas as condições em que não foi obtida simetria do tensor. Contudo, como para o caso triaxial não existe componentes de corte, é representado na figura 5.14 a assimetria dos tensores para o caso3b com constrangimento de permeabilidade ativo, ainda que assim devido ao maior número de componentes representadas a escala utilizada não permita a melhor leitura do desvio obtido em relação à simetria do tensor.

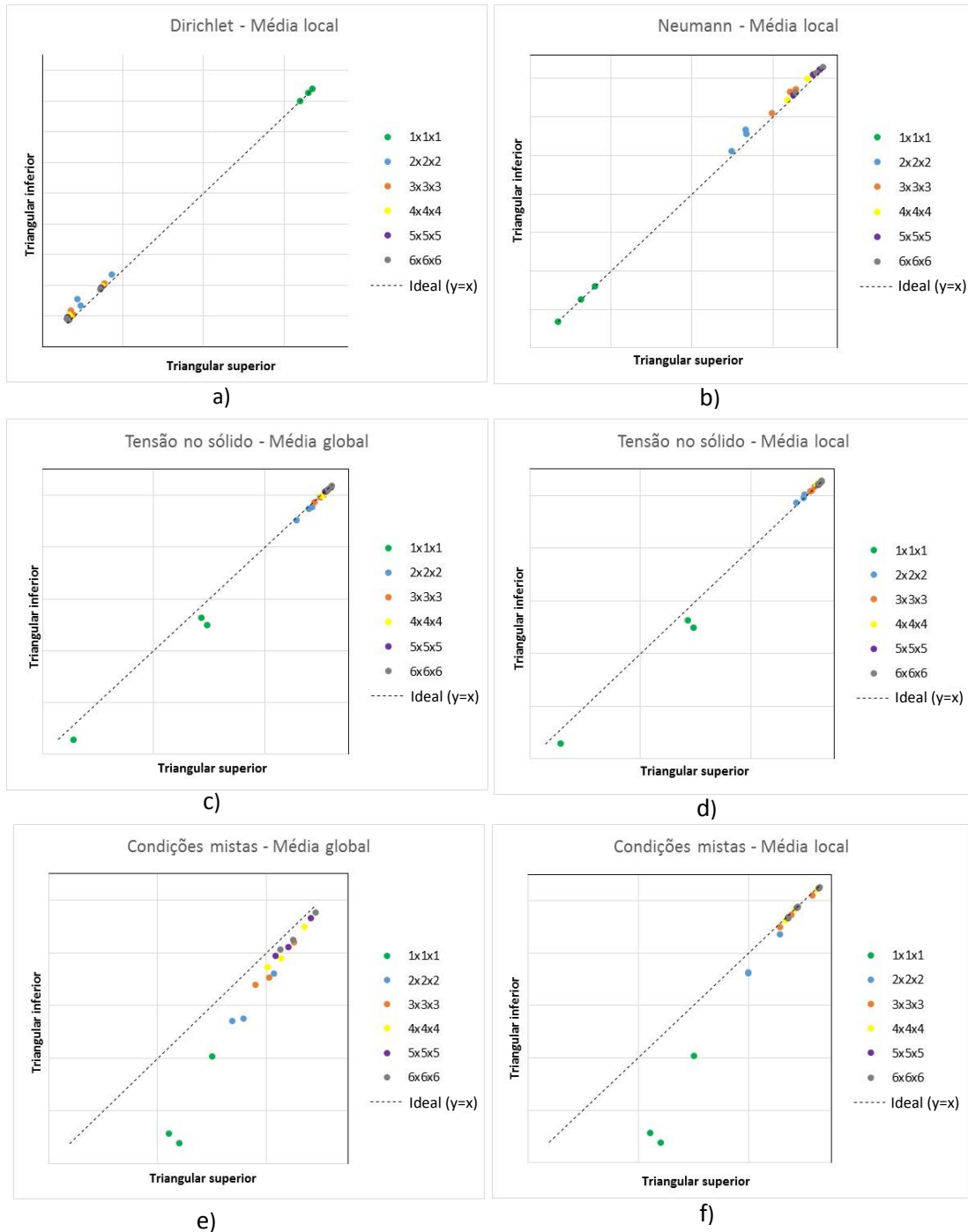


Figura 5.13 - Representação gráfica da assimetria dos tensores estimados através de condições não-normalizadas para o caso **triaxial** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet – Média local; b) Condições de Neumann – Média local; c) Tensão constante na fase sólida – Média global; d) Tensão constante na fase sólida – Média local; e) Condições mistas – Média global; f) Condições mistas – Média local.

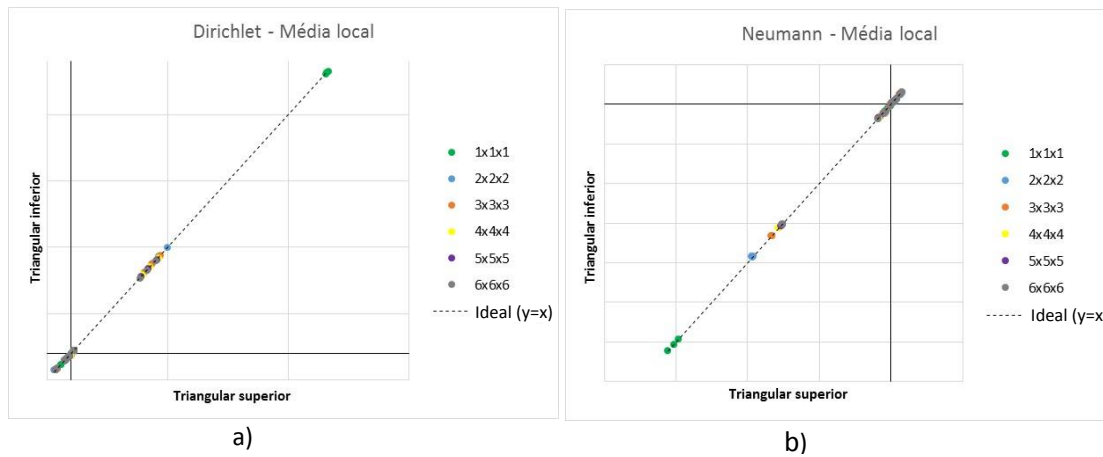


Figura 5.14 - Representação gráfica da assimetria dos tensores estimados através de condições não-normalizadas para o caso **corte3b** com $k^* = 50\%$. a) Condições de Dirichlet – Média local; b) Condições de Neumann – Média local.

Para as condições de Dirichlet, são representadas as componentes do tensor de rigidez estimado, enquanto para as condições de Neumann, tensão no sólido e mistas, são representadas as componentes do tensor da *compliance*.

Pelos gráficos apresentados verifica-se que a maior assimetria do tensor acontece para o menor número de repetições da célula unitária, com exceção nas condições de Dirichlet e de Neumann utilizando a média local, uma vez que para apenas uma célula é conseguida a simetria pois a média local é igual à média global (onde se obteve simetria total do tensor). Contudo, com o aumento do número de repetições da célula unitária, verifica-se um menor desvio em relação à simetria do tensor.

Os maiores desvios verificam-se na utilização das condições mistas – média global, no entanto, com a estimativa por médias locais os valores convergem mais rapidamente diminuindo a assimetria do tensor mesmo para um baixo fator de escala. Comparando por exemplo a figura 5.13e com a figura 5.3d, verifica-se que a assimetria obtida no tensor estimado não influencia a convergência dos respectivos coeficientes do tensor.

5.2.3 Energia ou compliance

O estudo da convergência da densidade de energia elástica de deformação e de tensão é apresentado respetivamente nas figuras 5.15 e 5.16. O desvio é estimado segundo a eq. (5.2) para o caso da densidade de energia elástica de deformação e segundo a eq. (5.3) para a de tensão.

$$\text{Desvio [\%]} = \frac{(\bar{\epsilon} \mathbf{E}^* \bar{\epsilon} - \bar{\epsilon} \mathbf{E}^H \bar{\epsilon})}{\bar{\epsilon} \mathbf{E}^H \bar{\epsilon}} \times 100 \quad (5.2)$$

$$\text{Desvio [\%]} = \frac{(\bar{\sigma} \mathbf{C}^* \bar{\sigma} - \bar{\sigma} \mathbf{C}^H \bar{\sigma})}{\bar{\sigma} \mathbf{C}^H \bar{\sigma}} \times 100 \quad (5.3)$$

Onde \mathbf{E}^* e \mathbf{C}^* representam respetivamente o tensor de rigidez e de flexibilidade estimados pelas condições de Dirichlet (\mathbf{E}^D e \mathbf{C}^D) ou de Neumann (\mathbf{E}^N e \mathbf{C}^N).

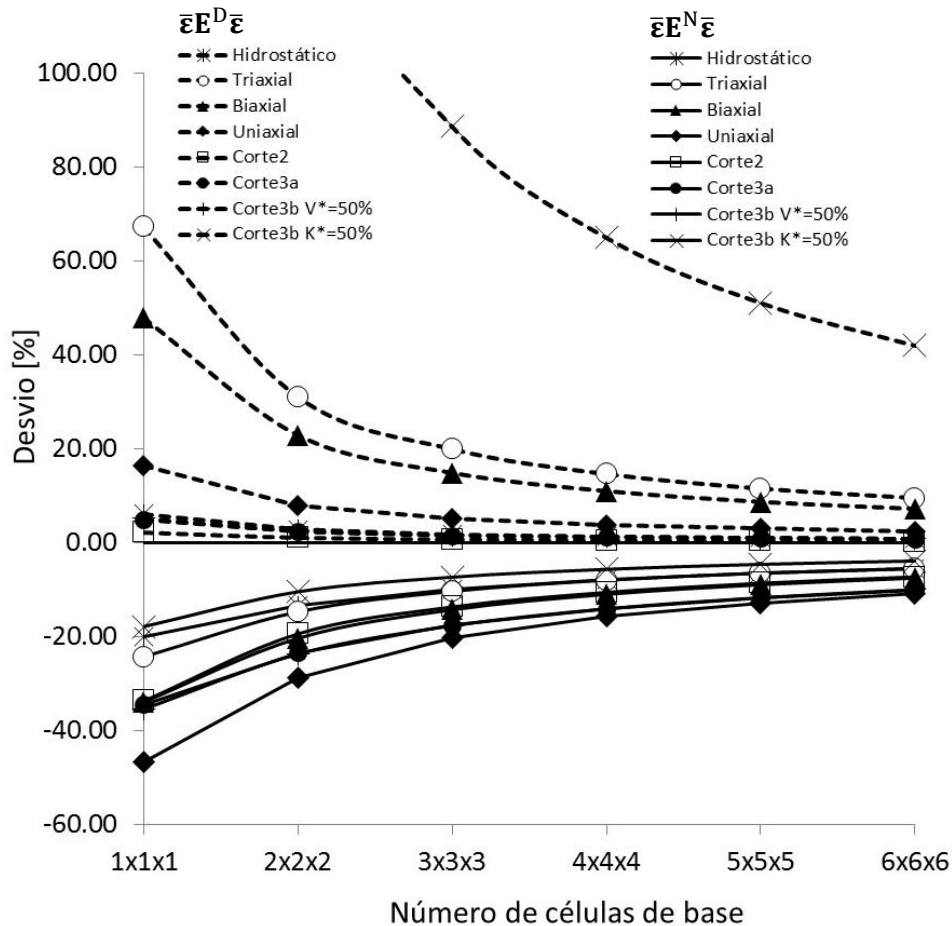


Figura 5.15 - Convergência da densidade de energia de deformação para as condições de Dirichlet (linhas a tracejado) e de Neumann (linhas sólidas). Adaptado de Coelho *et al.*, (2015)

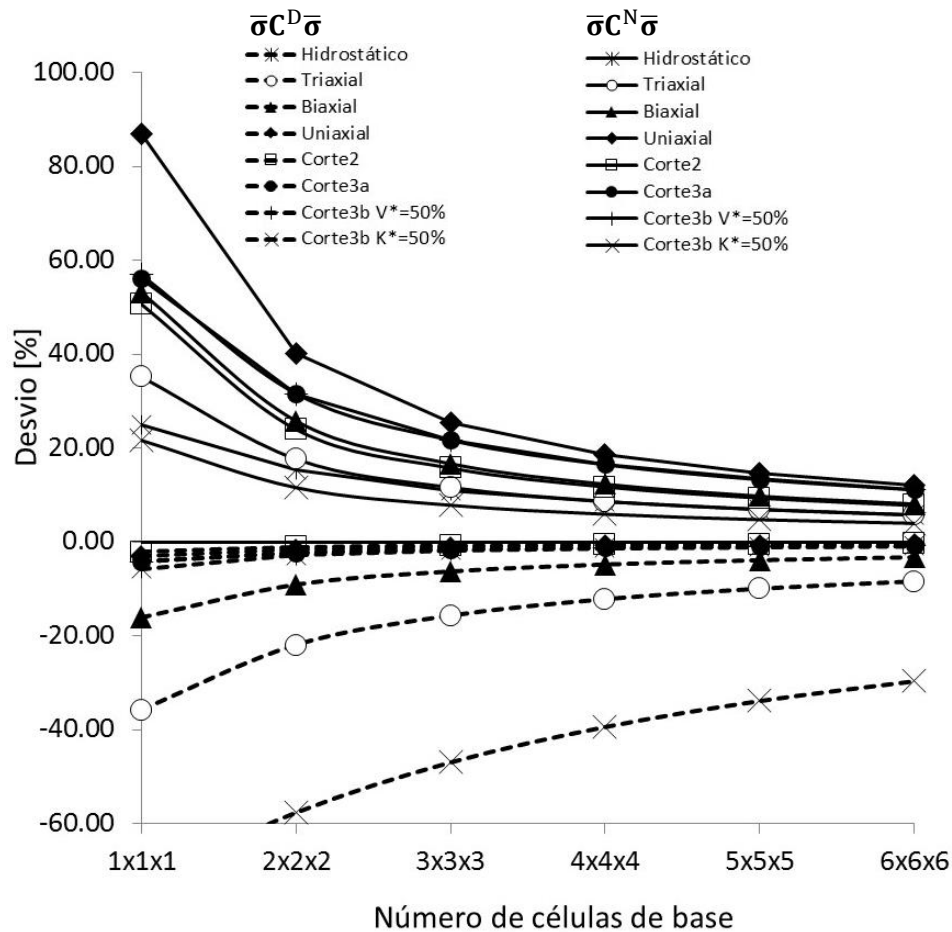


Figura 5.16 - Convergência da densidade de energia de tensão para as condições de Dirichlet (linhas a tracejado) e de Neumann (linhas sólidas). Adaptado de Coelho *et al.*, (2015)

Através da figura 5.15 e 5.16 verifica-se uma rápida convergência dos tensores estimados para os tensores homogeneizados (em termos de energia). Ao contrário do que acontecia na comparação das componentes dos tensores, aqui a convergência é consistente, i.e., para a densidade de energia elástica de deformação estimada através das condições de Dirichlet, os valores da mesma convergem sempre sobrestimando os valores homogeneizados, já as condições de Neumann subestimam os valores homogeneizados. De forma contrária, para o caso da densidade de energia elástica de tensão as condições de Neumann apresentam uma convergência sobrestimando o valor homogeneizado enquanto as condições de Dirichlet subestimam esse valor.

Em conformidade com os resultados apresentados na secção 5.2.2, no estudo em termos de energia, os maiores desvios obtidos verificam-se também para o caso3 com constrangimento de permeabilidade ativo, onde para o maior fator de escala em estudo se verificam erros na ordem dos 40%. Já nos restantes casos, para o mesmo fator de escala, foram obtidos desvios muito baixos, < 20% para $n = 6$.

6. Conclusões e desenvolvimentos futuros

A presente dissertação contribui para a investigação do estudo de efeitos de escala nas propriedades elásticas de materiais compósitos de microestrutura periódica com diferentes graus de anisotropia. Estes materiais possuem uma grande gama de aplicações na indústria, nomeadamente no projeto de *scaffolds* (suportes biomiméticos), uma vez que apresentam propriedades únicas que não estão presentes nos materiais convencionais.

A teoria da homogeneização assume condições fronteira periódicas e também periodicidade infinita do meio (resolve um problema adimensional), e uma vez que tal não se verifica na prática, aqui fez-se uma comparação das propriedades elásticas homogeneizadas com as mesmas estimadas por ensaios mecânicos realizados numericamente.

Em primeiro lugar, tem-se um conjunto de microestruturas (células unitárias) obtidas através da resolução de problemas de otimização topológica que minimizam a *compliance* sujeitos a constrangimentos de volume ou de permeabilidade. Embora não seja possível cobrir todos os possíveis modelos de microestrutura, acredita-se que os poucos aqui selecionados constituem um bom conjunto representativo para a análise de efeitos de escala uma vez que abrange um largo espectro de graus de anisotropia.

Com a suposição de periodicidade assumida pela teoria da homogeneização, esta apenas analisa uma única célula, uma vez que assim garante o mesmo resultado para qualquer número de células. Na realidade, o material compósito é gerado através da repetição da célula unitária n vezes em cada direção espacial ($n \times n \times n$), onde neste trabalho n varia de 1 até 6. Para cada fator de escala n , o compósito é submetido a seis testes numéricos (três longitudinais e três de corte), aplicando condições fronteira de tensão ou de deslocamento. As respostas mecânicas são medidas em termos de tensão e de deformação. Os rácios entre as médias das tensões e deformações fornecem estimativas dos coeficientes elásticos que dependem do fator de escala n . O objetivo aqui é o estudo da convergência dos valores estimados para os valores homogeneizados.

A estimativa das propriedades elásticas de materiais compósitos porosos apresenta alguns desafios, particularmente utilizando as condições de Neumann, uma vez que a aplicação de uma tensão diretamente em elementos da fase de vazio leva a uma excessiva deformação dos mesmos, subestimando em demasia a rigidez apresentada pelo compósito no seu total. Contudo, quando se realiza o estudo de materiais compósitos constituídos por dois materiais (não porosos) a convergência das propriedades estimadas para as obtidas pela homogeneização melhora significativamente. Verifica-se também que a convergência mais rápida é obtida nos coeficientes pertencentes à diagonal dos tensores elásticos e quando são utilizadas as condições fronteira alternativas, ainda que estas apenas sejam aplicadas em materiais ortotrópicos. Já a utilização das condições de Dirichlet permitiu a realização do estudo da convergência para materiais que apresentam um menor número de planos de simetria. Os coeficientes elásticos não longitudinais e fora da diagonal apresentam uma convergência mais lenta, justificando a importância da análise de efeitos de escala, nomeadamente para materiais anisotrópicos onde se verificam os maiores desvios. No geral, a densidade de energia elástica de tensão e de deformação apresenta uma convergência mais rápida do que os coeficientes do tensor individualmente.

O presente trabalho indica que para fins práticos, até mesmo para microestruturas com um baixo fator de escala ($n = 6$), é admissível utilizar os valores obtidos pela teoria da homogeneização. Os resultados obtidos neste estudo são consistentes com os trabalhos publicados anteriormente direcionados para microestruturas bidimensionais com simetria de material.

Uma vez que este trabalho coloca em foco os materiais compósitos porosos, seria de interesse o desenvolvimento deste estudo para compósitos de dois ou mais constituintes e ainda materiais compósitos laminados. A investigação dos locais de maiores tensões acumuladas no material e a comparação dessas mesmas tensões com as tensões homogeneizadas é um assunto a ser desenvolvido, pois a grande maioria dos trabalhos publicados acerca de materiais compósitos de microestrutura periódica não explora tanto a distribuição de tensões no material.

Referências bibliográficas

- A**ndreassen, C.S., Andreassen, E., Jensen, J.S., Sigmund, O. (2014), On the realization of the bulk modulus bounds for two-phase viscoelastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63, 228-241.
- Andreassen, E., Jensen, J.S. (2014), Topology optimization of periodic microstructures for enhanced dynamic properties of viscoelastic composite materials. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 49, 695-705.
- Andreassen, E., Lazarov, B.S., Sigmund, O. (2014), Design of manufacturable 3D extremal elastic microstructure. *Mechanics of Materials*, 69, 1-10.
- Ashby, M.F., Bréchet, Y.J.M., Cebon, D., Salvo, L. (2004), Selection strategies for materials and processes. *Materials & Design*, 25, 51-67.
- Ashby, M.F. (2008), *The CES EduPack database of natural and man-made materials*. Cambridge, UK: Cambridge University and Granta Design.
- B**endsøe, M.P., Kikuchi, N. (1988), Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 71, 197-224.
- Bendsøe, M.P., Sigmund, O. (2003), *Topology optimization theory, methods and applications*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- Boeing (2013), 787 Aircraft Rescue & Firefighting Composite Structure. [Consult. 28 Fev. 2015], disponível em
WWW<URL:http://www.boeing.com/assets/pdf/commercial/airports/faqs/787_composite_arff_data.pdf>
- Böhlke, T., Brüggemann, C. (2001), Graphical Representation of the Generalized Hooke's Law. *Technische Mechanik*, 21, 145-158.
- C**adman, J.E., Zhou, S., Chen, Y., Li, Q. (2013), On design of multi-functional microstructural materials. *Journal of Materials Science*, 48, 51-66.
- Chadwick, P., Vianello, M., Cowin, S.C. (2001), A new proof that the number of linear elastic symmetries is eight. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49, 2471-2492.
- Challis, V.J., Roberts, A.P., Wilkins, A.H. (2008), Design of three dimensional isotropic microstructures for maximized stiffness and conductivity. *International Journal of Solids and Structures*, 45, 4130-4146.
- Challis, V.J., Guest, J.K., Grotowski, J.F. (2012), Computationally generated cross-property bounds for stiffness and fluid permeability using topology optimization. *International Journal of Solids and Structures*, 49, 3397-3408.

- Chen, W., Liu, S. (2014), Topology optimization of microstructures of viscoelastic damping materials for a prescribed shear modulus. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 50, 287-296.
- Coelho, P.G. (2009), Modelos hierárquicos para a análise e síntese de estruturas e materiais com aplicações à remodelação óssea. Tese de Doutoramento. Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Lisboa.
- Coelho, P.G., Fernandes, P.R., Rodrigues, H.C. (2011), Multiscale modeling of bone tissue with surface and permeability control. *Journal of Biomechanics*, 44, 321-329.
- Coelho, P.G., Amiano, L.D., Guedes, J.M., Rodrigues, H.C. (2015), Scale-size effects analysis of optimal periodic material microstructures designed by the inverse homogenization method. *Composite & Structures* (submitted and under review).
- D**ias, M.R., Guedes, J.M., Flanagan, C.L., Hollister, S.J., Fernandes, P.R. (2014), Optimization of scaffold design for bone tissue engineering: A computational and experimental study. *Medical Engineering & Physics*, 36, 448-457.
- G**uedes, J.M., Kikuchi, N. (1990), Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element method. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 83, 143-198.
- G**uedes, J.M., Rodrigues, H.C, Bendsøe, M.P. (2003), A material optimization model to approximate energy bounds for cellular materials under multiload conditions. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 25, 446-452.
- Guest, J.K, Prévost, J.H (2006), Optimizing multifunctional materials: Design of microstructures for maximized stiffness and fluid permeability. *International Journal of Solids and Structures*, 43, 7028-7047.
- H**ollister, S.J., Kikuchi, N. (1992), A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites. *Computational Mechanics*, 10, 73-95.
- J**ones, R.M. (1975), *Mechanics of composite materials*. Scripta Book/McGraw-Hill, Washington, D.C.
- K**ang, H., Lin, C.Y., Hollister, S.J. (2010), Topology optimization of three dimensional tissue engineering scaffold architectures for prescribed bulk modulus and diffusivity. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 42, 633-644.
- M**ase, G.E., Mase, G.T. (1992), *Continuum Mechanics for Engineers*. CRC Press, Boca Raton, FL.

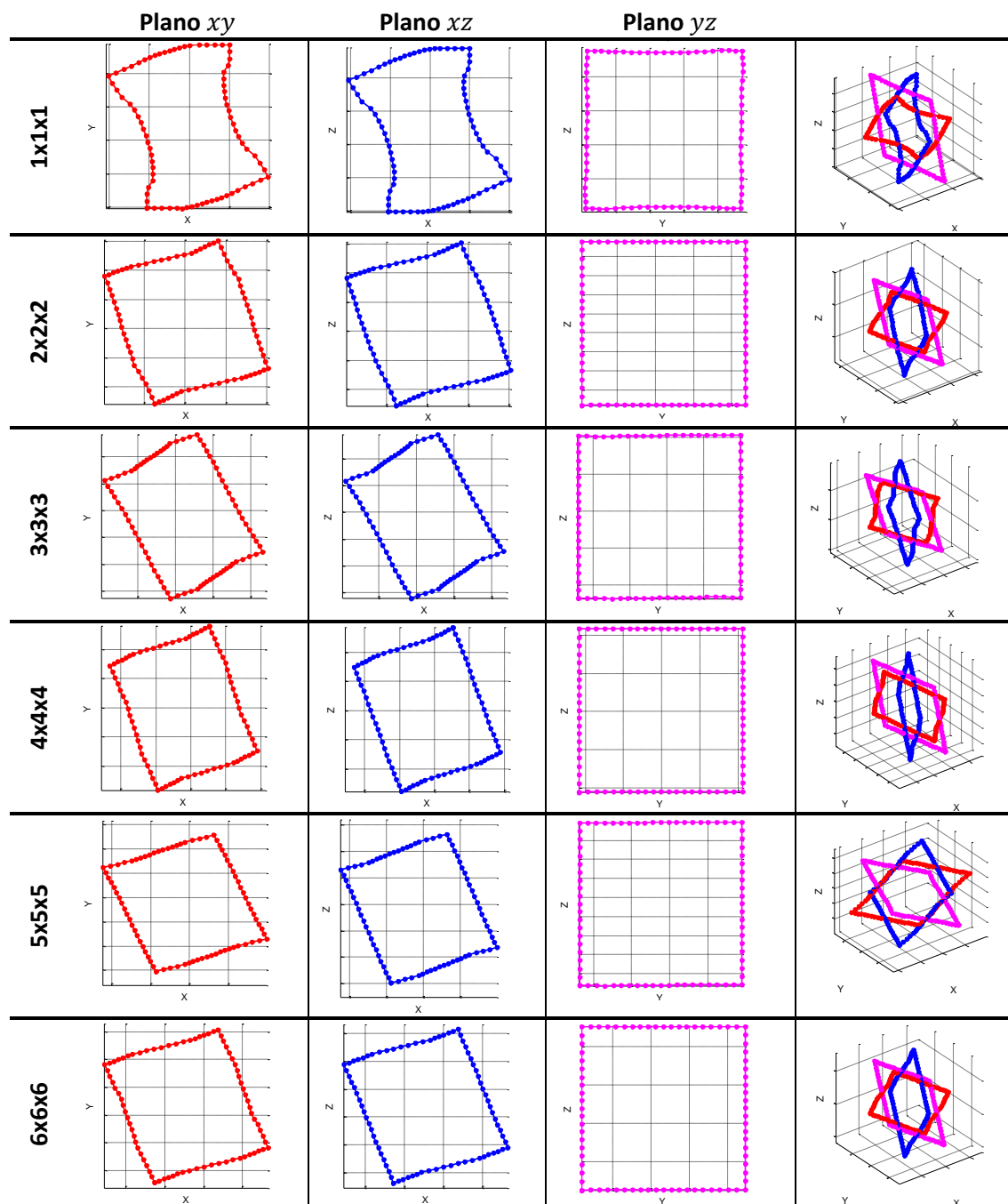
- O**kereke, M.I., Akpoyomare, A.I., Bingley, M.S. (2014), Virtual testing of advanced composites, cellular materials and biomaterials: A review. *Composites Part B: Engineering*, 60, 637-662.
- P**ecullan, S., Gibiansky, L.V., Torquato, S. (1999), Scale effects on the elastic behavior of periodic and hierarchical two-dimensional composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47, 1509-1542.
- R**adman, A., Huang, X., Xie, Y.M. (2013), Topological optimization for the design of microstructures of isotropic cellular materials. *Engineering Optimization*, 45, 1331-1348.
- Radman, A., Huang, X., Xie, Y.M. (2014), Topological design of microstructures of multi-phase materials for maximum stiffness or thermal conductivity. *Computational Materials Science*, 91, 266-273.
- Reddy, J.N. (1997), *Mechanics of laminated composite plates and shells: Theory and analysis*. CRC Press, Boca Raton, FL.
- S**igmund, O. (2001), A 99 line topology optimization code written in matlab. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 21, 120-127.
- Sigmund, O. (2009), Systematic design of metamaterials by topology optimization. *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems*, 13, 151-159.
- Svanberg, K. (1987), The method of moving asymptotes – a new method for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24, 359-373.
- V**atanabe, S.L., Paulino, G.H., Silva, E.C.N. (2013), Design of functionally graded piezocomposites using topology optimization and homogenization – Toward effective energy harvesting materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 266, 205-218.
- W**ieding, J., Souffrant, R., Mittelmeier, W., Bader, R. (2013), Finite element analysis on the biomechanical stability of open porous titanium scaffolds for large segmental bone defects under physiological load conditions. *Medical Engineering and Physics*, 35, 422-432.
- Wieding, J., Wolf, A., Bader, R. (2014), Numerical optimization of open-porous bone scaffold structures to match the elastic properties of human cortical bone. *Journal of Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 37, 56-68.
- Wu, S., Liu, X., Yeung, K.W.K., Liu, C., Yang, X. (2014), Biomimetic porous scaffolds for bone tissue engineering. *Materials Science and Engineering R*, 80, 1-36.
- X**ie, Y.M., Zuo, Z.H., Huang, X. (2012), Convergence of topological patterns of optimal periodic structures under multiple scales. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 46, 41-50.

- Xie, Y.M., Yang, X., Shen, J., Yan, X., Ghaedizadeh, A., Rong, J., Huang, X., Zhou, S. (2014), Designing orthotropic materials for negative or zero compressibility. *International Journal of Solids and Structures*, 51, 4038-4051.
- Xu, S., Cheng, G. (2010), Optimum material design of minimum structural compliance under seepage constraint. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 41, 575-587.
- Y**ang, X.Y., Huang, X., Rong, J.H., Xie, Y.M. (2013), Design of 3D orthotropic materials with prescribed ratios for effective Young's moduli. *Computational Materials Science*, 67, 229-237.
- Z**ohdi, T.I., Wriggers, P. (2004), *An introduction to computational micromechanics*. Springer, Berlin.
- Zuo, H.Z., Huang, X., Rong, J., Xie, Y.M. (2013), Multi-scale design of composite materials and structures for maximum natural frequencies. *Materials and Design*, 51, 1023-1034.
- Zuo, H.Z., Huang, X., Yang, X., Rong, J.H., Xie, Y.M. (2013), Comparing optimal material microstructures with optimal periodic structures. *Computational Materials Science*, 69, 137-147.

Anexos

Anexo I.

Tabela A. 1 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio longitudinal na direção x aplicando as condições de Neumann.



Anexo II.

Tabela A. 2 - Efeitos de escala na deformação da célula unitária – Ensaio de corte no plano xy aplicando as condições de Neumann.

